

Université de Montréal

Méthode de suivi de front implicite, eulérienne,
pour un système diphasique bas Mach en une
dimension spatiale

par

Eva Kardhashi

Département de mathématiques et de statistique

Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures

en vue de l'obtention du grade de

Maître ès sciences (M.Sc.)
en Mathématiques

janvier 2007



QA

3

U54

2007

V.007

AVIS

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal

Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé

Méthode de suivi de front implicite, eulérienne,
pour un système diphasique bas Mach en une
dimension spatiale

présenté par

Eva Kardhashi

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

Paul Arminjon

(président-rapporteur)

Anne Bourlioux

(directeur de recherche)

Robert G. Owens

(membre du jury)

Mémoire accepté le:

03 Octobre 2006

SOMMAIRE

Ce travail a pour objet la mise en oeuvre d'une méthode de suivi de front implicite, eulérienne, d'ordre deux, pour un système diphasique à bas nombre de Mach en une dimension spatiale. Nous élaborons un schéma en variables eulériennes où le suivi d'interface entre les deux fluides est réalisé grâce à un algorithme de suivi de front. On explique soigneusement cet algorithme de suivi de front en y décrivant différentes façons de gérer le front suivant sa position dans les mailles. La mise en oeuvre de cette méthode est faite pour des problèmes sous forme conservative. La méthode est globalement conservative.

La stratégie est illustrée et validée pour le problème d'advection à vitesse constante d'un scalaire avec une condition initiale discontinue. Elle est ensuite validée pour le problème de Stefan unidimensionnel avec une vitesse de propagation de l'interface définie par une fonction du saut des flux de chaleur à l'interface. On propose ainsi une méthode de suivi de front implicite, eulérienne, pour le système diphasique à faible nombre de Mach.

Mots-clés : écoulement diphasique, système bas Mach, suivi d'interface, méthode de suivi de front, méthode implicite.

SUMMARY

This work aims at the implementation of an Eulerian, second-order accurate, implicit front-tracking method for a low Mach number diphasic system in one space dimension. We design a numerical scheme in Eulerian variables where the interface between the two fluids is captured with a front tracking technique. We explain carefully this front-tracking algorithm. We describe different ways to manage the front according to its mesh position. We implement this method for some conservative problems. This method is globally conservative.

The strategy is illustrated and validated for an advection problem with a constant speed of a scalar with discontinuous initial conditions. It is next validated for the one-dimensional Stefan problem with an interface propagation velocity defined by a function of the jump of the heat fluxes at the interface. We propose finally an Eulerian implicit front-tracking method for a low Mach number diphasic system.

Key-words : diphasic flow, low Mach number system, interface-capturing, front-tracking technique, implicit method.

REMERCIEMENTS

Je suis tout particulièrement reconnaissante envers mon directeur de recherche, le professeur Anne Bourlioux, d'avoir été plus que disponible, toujours disposée à m'orienter ou à corriger mon travail, tout en me laissant la liberté de travailler à ma façon et d'explorer les terrains qui m'attiraient le plus. Les encouragements constants qu'elle m'a adressés ont également compté pour beaucoup et je suis reconnaissante pour ce qu'elle m'a appris et tout ce qu'elle a fait pour moi. Je la remercie, en plus, de m'avoir partiellement financé durant la période de ce travail.

Merci à Stephane Dellacherie pour sa disponibilité.

Je remercie le président du jury, Paul Arminjon, et les autres membres du jury, Robert G. Owens, Anne Bourlioux, d'avoir accepté d'évaluer ce travail.

Merci évidemment à mes parents pour avoir su m'encourager à leur façon depuis le tout début de mon parcours académique, mais aussi pour avoir été d'un support incomparable dans tous ces moments où une fille a besoin de ses parents.

Merci à mon époux Taulant pour toutes ses petites attentions qui m'ont rendu la tâche plus facile en période de pression, et pour la patience dont il a dû faire preuve en m'aidant avec notre fils nouveau-né Énes.

TABLE DES MATIÈRES

Sommaire	iii
Summary	iv
Remerciements	v
Liste des figures	ix
Liste des tableaux	xii
Chapitre 1. Introduction	1
1.1. Le système de Navier-Stokes diphasique compressible.....	2
1.2. Obtention du système diphasique bas Mach.	5
1.3. Le système diphasique bas Mach pour deux gaz parfaits.	8
1.4. Un schéma totalement conservatif.	9
1.5. À propos des simulations numériques.....	10
Chapitre 2. Méthode de suivi de front pour l'advection	14
2.1. Le problème d'advection	14
2.2. L'algorithme de suivi de front	15
2.2.1. Formulation 1.....	18
2.2.2. Formulation 2.....	21
2.2.3. Formulation combinée.....	23
2.3. Résultats numériques et conclusions.....	26

Chapitre 3. Méthode de suivi de front implicite pour le problème de Stefan.....	33
3.1. Le problème de Stefan	33
3.2. Méthode de résolution du problème de Stefan.....	34
3.2.1. Discrétisation temporelle et spatiale.....	34
3.2.2. Algorithme de suivi de front	35
3.2.2.1. Bilans conservatifs pour les mailles proches du front.....	35
3.2.2.2. Une approximation d'ordre deux pour le flux de chaleur....	38
3.2.2.3. Discrétisation de l'équation de la température.....	41
3.2.3. Système discret du problème de Stefan.....	48
3.2.4. Algorithme itératif.....	50
3.2.5. Résultats numériques et conclusions.....	52
Chapitre 4. Méthode de suivi de front implicite eulérienne pour le système diphasique bas Mach	60
4.1. Développement de la méthode de résolution du système diphasique bas Mach en une dimension	60
4.1.1. Schéma de discrétisation du système diphasique bas Mach.....	63
4.1.2. Algorithme de suivi de front pour l'équation de la conservation de la masse totale.....	64
4.1.2.1. Flux de masse pour le schéma amont (ordre 1) - mailles régulières	64
4.1.2.2. Flux de masse pour le schéma amont TVD (ordre 2) - mailles régulières	64
4.1.3. Approche numérique pour l'équation de la pression.....	70
4.1.4. Approche numérique pour l'équation de la vitesse.....	71
4.1.4.1. Une approximation d'ordre deux pour le flux de chaleur....	71
4.1.5. Approche numérique pour l'équation de la température	77

4.2. Algorithme itératif.....	78
4.3. Résultats numériques et conclusions.....	80
4.3.1. Estimation d'erreur et ordre de convergence de la méthode avec suivi de front et de la méthode eulérienne de [1] pour le système diphasique bas Mach	85
4.3.2. Comparaison de la méthode de suivi de front et de la méthode eulérienne de [1]	91
Chapitre 5. Conclusion	96
Bibliographie	98

LISTE DES FIGURES

1.1.1	Domaine Ω	2
1.5.1	Suivi de l'interface dans le plan (x, t)	12
2.2.1	Maillage.	15
2.2.2	CAS A : le front ne change pas de maille.	17
2.2.3	Bilans conservatifs <i>gauche et droite</i>	20
2.2.4	Bilans conservatifs <i>équivalents</i>	21
2.2.5	CAS B : le front change de maille à droite.	24
2.3.1	Solution sans suivi de front, ordre de précision 1, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	27
2.3.2	Solution sans suivi de front, ordre de précision 1, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	27
2.3.3	Solution sans suivi de front, ordre de précision 2, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	28
2.3.4	Solution sans suivi de front, ordre de précision 2, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	28
2.3.5	Solution avec suivi de front, ordre de précision 1, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	29
2.3.6	Solution avec suivi de front, ordre de précision 1, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	29
2.3.7	Solution avec suivi de front, ordre de précision 2, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$	30

2.3.8	Solution avec suivi de front, ordre de précision 2, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$...	30
2.3.9	Erreur, $CFL = 0.3$, $a = 1$ et $T_{Final} = 0.4$	32
2.3.10	Erreur, $CFL = 0.8$, $a = 1$ et $T_{Final} = 0.4$	32
3.2.1	CAS A : le front ne change pas de maille.....	35
3.2.2	CAS B : le front change de maille à droite.....	37
3.2.3	Algorithme itératif.....	51
3.2.4	Température, solution formulation 2, figure à gauche $N = 15$, figure à droite $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$	55
3.2.5	Température, solution formulation combinée, figure à gauche $N = 15$, figure à droite $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$	55
3.2.6	Choix des points pour la formulation 2.....	56
3.2.7	Choix des points pour la formulation combinée.....	57
3.2.8	Erreur en fonction de x	59
4.1.1	Domaine Ω unidimensionnel.....	60
4.1.2	CAS A : le front ne change pas de maille.....	66
4.1.3	CAS B : le front change de maille à droite.....	69
4.2.1	Algorithme itératif.....	79
4.3.1	Figure à gauche, densité, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la densité en fonction de x	81
4.3.2	Figure à gauche, densité, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la densité en fonction de x	81
4.3.3	Figure à gauche, température, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} =$ 1 , $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la température en fonction de x	82

4.3.4	Figure à gauche, température, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la température en fonction de x	82
4.3.5	Figure à gauche, vitesse, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la vitesse en fonction de x	83
4.3.6	Figure à gauche, vitesse, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la vitesse en fonction de x	83
4.3.7	Densité, formulation combinée, $N=128$, $T_{final} = 30$, $dt = dx/4$,	84
4.3.8	Température, formulation combinée, $N=128$, $T_{final} = 30$, $dt = dx/4$, ..	84
4.3.9	Relation géométrique entre les maillages raffiné ou grossier	85
4.3.10	Température, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$	86
4.3.11	Vitesse, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$	87
4.3.12	Densité, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$	88
4.3.13	Position du front, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$...	89
4.3.14	Figure à gauche, position de l'interface Σ^a , méthode [1] et méthode avec suivi de front, figure à droite, position de l'interface Σ^b , méthode [1] et méthode avec suivi de front, $T_{final} = 1$, $N = 128$	93
4.3.15	Figure à gauche, température solution de [1], figure à droite, température solution avec suivi de front, $T_{final} = 0.6$	95

LISTE DES TABLEAUX

2.3.1	Norme L_1 de l'erreur, schéma avec suivi de front	31
3.2.1	Comparaison de la vitesse numérique V entre les formulation 1, 2 et 3 (vitesse exacte $V_{ex} = 1$), $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$	53
3.2.2	Dépendance du saut de la vitesse en fonction de dx	56
3.2.3	Norme L_1 de l'erreur pour des choix différents de dx , tableau à gauche : formulation 2, tableau à droite : formulation 3, $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$.	58
4.3.1	Température T , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction de dx .	86
4.3.2	Vitesse U , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	87
4.3.3	Densité ρ , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	88
4.3.4	Position du front X_F , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	89
4.3.5	Température T dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	90
4.3.6	Vitesse U dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	90
4.3.7	Densité ρ dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx	91
4.3.8	Pas de temps pour les deux méthodes	92
4.3.9	Nombre d'itérations pour les deux méthodes	92
4.3.10	Température T , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière	93

4.3.11 Vitesse U , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière	94
4.3.12 Densité ρ , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière	94

Chapitre 1

INTRODUCTION

Le modèle principal utilisé dans ce travail est celui présenté par Stéphane Dellacherie [1]. Il sert à la simulation numérique directe (SND) pour les écoulements diphasiques. Ceci est un sujet très important dans le contexte de la simulation numérique de coeurs de réacteurs nucléaires. Plusieurs approches ont déjà été utilisées dans ce domaine et il existe déjà des études effectuées en SND. Dans le coeur d'un réacteur nucléaire, le nombre de Mach est très faible. Plusieurs auteurs considèrent que les deux fluides correspondant à chacune des phases sont des fluides incompressibles et le modèle utilisé est donc le système de Navier-Stokes diphasique incompressible.

Dans le coeur d'un réacteur nucléaire, il existe cependant des phénomènes de changement de phase liquide-vapeur. Tout changement de phase induit localement un transfert d'énergie thermique. Il est donc plus raisonnable de considérer qu'au moins une des phases, la phase vapeur est compressible, tandis que la phase liquide peut être considérée comme incompressible.

Ces remarques présentées par Dellacherie dans [1] l'ont conduit à considérer plutôt le système diphasique compressible bien que le nombre de Mach soit très faible. Dans cette limite, les écoulements considérés sont des écoulements subsoniques. Il n'y a pas d'ondes de choc et par conséquent il n'y a pas de discontinuités dans les champs de vitesse et de pression.

1.1. LE SYSTÈME DE NAVIER-STOKES DIPHASIQUE COMPRESSIBLE

Soit Ω un domaine ouvert borné inclus dans R^d , $d = 1, 2$, ou 3 . Dans ce domaine, l'écoulement est supposé diphasique, ce qui entraîne que Ω est l'union de deux sous-domaines ouverts $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$ tels que les équations d'état et les coefficients de transport du fluide dans $\Omega_1(t)$ sont très différents de ceux dans $\Omega_2(t)$. On dira que le fluide est dans la phase 1 ou dans la phase 2 pour respectivement les sous-domaines $\Omega_1(t)$ et $\Omega_2(t)$.

La surface $\Sigma(t)$ localise en tout temps t l'interface entre les fluides 1 et 2.

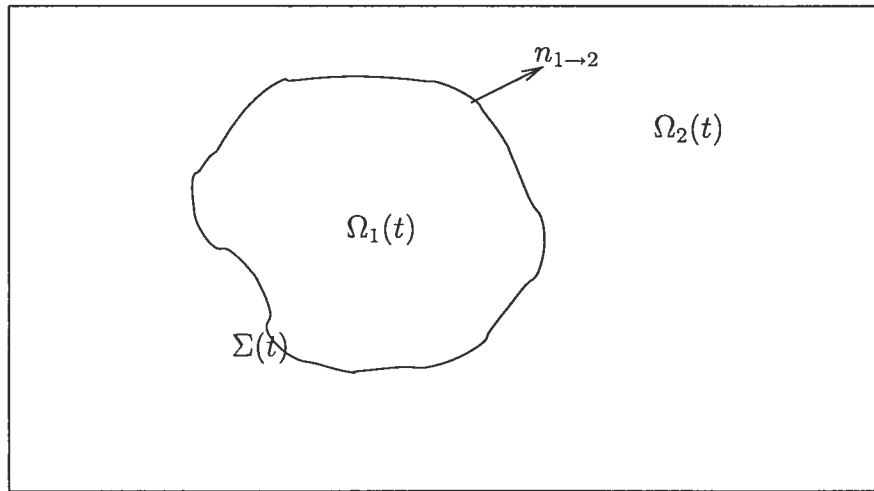


FIG. 1.1.1. Domaine Ω

Nous reprenons ici la formulation de [1]. La formulation du système de Navier-Stokes diphasique compressible s'écrit sous forme conservative comme suit :

$$\partial_t(\rho Y_1) + \nabla \cdot (\rho u Y_1) = 0,$$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0,$$

$$\partial_t(\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}}(Y_1) + \rho g,$$

$$\partial_t(\rho E) + \nabla \cdot (\rho u E) = -\nabla \cdot (P u) + \nabla \cdot q(Y_1) + \nabla \cdot [\bar{\bar{\sigma}}(Y_1) \cdot u] + \rho g \cdot u$$

(1.1.1)

où

$$\bar{\sigma}(Y_1) = \mu(Y_1) \left[\nabla u + (\nabla u)^t - \frac{2}{3}(\nabla \cdot u) \bar{I} \right],$$

$$q(Y_1) = \lambda(Y_1) \nabla T.$$

Les équations (1.1.1) sont respectivement la conservation de la masse dans chaque phase, la conservation de la masse totale, la conservation de la quantité de mouvement et la conservation de l'énergie totale. Le vecteur constant g représente la gravité. Les quantités physiques ρ , P , u , $E \equiv u^2/2 + \varepsilon$ (ε est l'énergie interne), $\bar{\sigma}$ et q sont respectivement la densité, la pression, la vitesse, l'énergie totale, le tenseur de viscosité de Newton et le flux de chaleur de Fourier. $Y_1(t, x)$ est une fonction continue par morceaux ; elle est donnée initialement par

$$Y_1(t=0, x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in \Omega_1(t=0), \\ 0 & \text{si } x \in \Omega_2(t=0), \end{cases} \quad (1.1.2)$$

$\Omega_k(t=0) \neq \{\emptyset\}$, ($k = 1, 2$) définit la topologie initiale de l'écoulement. On définit $\Omega_1(t \geq 0)$ et $\Omega_2(t \geq 0)$ par

$$\Omega_1(t) = \{x \in \Omega \text{ tel que } Y_1(t, x) = 1\}$$

et

$$\Omega_2(t) = \{x \in \Omega \text{ tel que } Y_1(t, x) = 0\}.$$

Similairement les formules suivantes sont valides dans tout le domaine :

$$Y_1(t, x) \in \{0, 1\},$$

$$\lambda(Y_1) = Y_1 \lambda_1 + (1 - Y_1) \lambda_2,$$

$$\mu(Y_1) = Y_1 \mu_1 + (1 - Y_1) \mu_2, \quad (1.1.3)$$

$$\rho(Y_1, T, P) = Y_1 \rho_1(T, P) + (1 - Y_1) \rho_2(T, P),$$

$$\varepsilon(Y_1, T, P) = Y_1 \varepsilon_1(T, P) + (1 - Y_1) \varepsilon_2(T, P)$$

où μ_k et λ_k , ($k = 1, 2$) sont respectivement la viscosité et la conductivité thermique, ce sont des constantes positives.

Les fonctions $\rho_k(T, P)$ et $\varepsilon_k(T, P)$ sont les équations d'état du fluide k , T est la température thermodynamique. Les conditions aux limites sont données par

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall x \in \Sigma(t) : \quad u|_{\Sigma_1(t)} = u|_{\Sigma_2(t)}, \\ \quad \quad \quad \bar{\sigma}(Y_1)|_{\Sigma_1(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} = \bar{\sigma}(Y_1)|_{\Sigma_2(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2}, \\ \quad \quad \quad T|_{\Sigma_1(t)} = T|_{\Sigma_2(t)}, \\ \quad \quad \quad \lambda_1 \nabla T|_{\Sigma_1(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} = \lambda_2 \nabla T|_{\Sigma_2(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} \end{array} \right. \quad (1.1.4)$$

et par

$$\left\{ \begin{array}{l} \forall x \in \partial\Omega : \quad u(t, x) = 0, \\ \quad \quad \quad \nabla T(t, x) \cdot n(x) = 0. \end{array} \right. \quad (1.1.5)$$

La notation $\phi|_{\Sigma_k(t)}$ ($\phi = (u, \bar{\sigma}(Y_1), T, \lambda_1 \nabla T)^T$) correspond à la valeur limite de $\phi(t, x)$ sur la surface $\Sigma(t)$, ($\Sigma_1(t) = \Sigma_2(t) = \Sigma(t)$). Le vecteur $n_{1 \rightarrow 2}$ est le vecteur normal unitaire à l'interface $\Sigma(t)$ et est orienté vers le fluide 2 (voir Figure 1.1.1). Les conditions (1.1.4) imposent la continuité de la vitesse, du flux visqueux, de la température et du flux de chaleur dans Ω malgré l'existence de la surface de discontinuité $\Sigma(t)$. Les conditions (1.1.5) imposent que le domaine borné Ω est thermiquement isolé.

Dellacherie a utilisé la forme non conservative pour dériver le système diphasique bas Mach. En introduisant la variable non conservative $h \equiv \varepsilon + P/\rho$ (l'enthalpie du fluide) et en notant que $\nabla \cdot [\bar{\sigma}(Y_1) \cdot u] - u \cdot \nabla \cdot \bar{\sigma}(Y_1) = \bar{\sigma}(Y_1) : \nabla u$, lorsque les champs de vitesse et de pression sont réguliers, le système (1.1.1) peut s'écrire sous la forme non conservative

$$D_t Y_1 = 0,$$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \quad (1.1.6)$$

$$\rho D_t u = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\sigma}(Y_1) + \rho g,$$

$$\rho D_t h = D_t P + \nabla \cdot q(Y_1) + \bar{\sigma}(Y_1) : \nabla u$$

où $D_t \equiv \partial_t + u \cdot \nabla$ est l'opérateur de dérivée particulaire. Les équations

$$\rho D_t h = D_t P + \nabla \cdot q(Y_1) + \bar{\bar{\sigma}}(Y_1) : \nabla u$$

et

$$\rho C_p D_t T = \alpha T D_t P + \nabla \cdot q(Y_1) + \bar{\bar{\sigma}}(Y_1) : \nabla u$$

sont équivalentes. En remplaçant dans (1.1.6), on obtient donc une formulation non conservative en température pour le système de Navier-Stokes diphasique compressible,

$$D_t Y_1 = 0,$$

$$\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \tag{1.1.7}$$

$$\rho D_t u = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\bar{\sigma}}(Y_1) + \rho g,$$

$$\rho C_p D_t T = \alpha T D_t P + \nabla \cdot [\lambda(Y_1) \nabla T] + \bar{\bar{\sigma}}(Y_1) : \nabla u$$

où

$$\alpha(Y_1, T, P) \equiv -\frac{1}{\rho(Y_1, T, P)} \cdot \frac{\partial \rho}{\partial T}(Y_1, T, P) \tag{1.1.8}$$

est le coefficient de compressibilité à pression constante.

$$C_p(Y_1, T, P) \equiv \frac{\partial h}{\partial T}(Y_1, T, P). \tag{1.1.9}$$

est la capacité calorifique à pression constante. $q = \lambda \nabla T$.

C'est à partir du système (1.1.7) que l'on va dériver le système diphasique bas Mach.

1.2. OBTENTION DU SYSTÈME DIPHASIQUE BAS MACH.

La discrétisation numérique du système de Navier-Stokes diphasique compressible à bas nombre de Mach est très délicate du fait de la grande différence entre la vitesse du son et la vitesse de l'écoulement.

Le nombre de Mach est un nombre sans dimension, qui exprime le rapport de la vitesse locale d'un fluide à la vitesse du son dans ce même fluide. Dellacherie [1] propose de simplifier le système (1.1.1) à l'aide d'un développement asymptotique en

puissances du nombre de Mach. En fait, la limite du nombre de Mach tendant vers zéro correspond à la limite de la vitesse du son partout infiniment grande (écoulement incompressible). Dans le cas unidimensionnel, l'information se déplace à la vitesse $u(x, t)$ pour les ondes matérielles, $u(x, t) + c(x, t)$ et $u(x, t) - c(x, t)$ pour les ondes acoustiques, ce qui entraîne que l'information transportée par les ondes acoustiques est transportée instantanément dans le domaine Ω . Dans la limite du nombre de Mach tendant vers zéro, le temps caractéristique du déplacement de ces ondes dans chaque fluide est très petit. Ceci constitue donc un défi énorme sur le plan de la discrétisation numérique : il faut que le pas de temps discret soit au plus du même ordre de grandeur que ce temps caractéristique sinon le schéma est instable dans la limite du faible nombre de Mach.

Le rôle principal du développement asymptotique est de filtrer ces ondes acoustiques. On prend donc une échelle de temps de référence beaucoup plus grande que l'échelle du temps caractéristique du déplacement de ces ondes dans chaque fluide.

Dans [1], Dellacherie établit formellement le système diphasique bas Mach. Le résultat du développement asymptotique est le système diphasique bas Mach dimensionné suivant, constitué des deux systèmes couplés

$$\begin{cases} D_t Y_1 = 0, \\ \rho C_p D_t T = \alpha T P'(t) + \nabla \cdot [\lambda(Y_1) \nabla T] \end{cases} \quad (1.2.1)$$

et

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = G(t, x), \\ \rho D_t u = -\nabla \Pi(t, x) + \nabla \cdot \bar{\sigma}(Y_1) + \rho g \hat{z} \end{cases} \quad (1.2.2)$$

avec

$$G(t, x) = -\frac{P'(t)}{\rho c^2} + \frac{\beta}{P(t)} \nabla \cdot [\lambda(Y_1) \nabla T] \quad (1.2.3)$$

et de l'équation intégral-différentielle non linéaire

$$P'(t) = \frac{\int_{\Sigma(t)} [\beta(Y_1, T, P)]_{\Sigma(t)} \lambda(Y_1) \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}} - \frac{\int_{\Omega} \frac{\partial \beta}{\partial T}(Y_1, T, P) \lambda(Y_1) (\nabla T)^2 dx}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\Gamma(Y_1, T, P)}} \quad (1.2.4)$$

avec $[\beta]_{\Sigma} \equiv \beta|_{\Sigma_1} - \beta|_{\Sigma_2}$.

La pression $\Pi(t, x)$ est appelée pression dynamique. Elle est introduite dans le développement asymptotique du système diphasique bas Mach (voir [1]).

Les fonctions ρ , λ , μ , α , C_p , β , c et Γ caractérisent les propriétés thermodynamiques des fluides 1 et 2. Elles sont respectivement définies par (1.1.3), (1.1.8), (1.1.9),

$$\beta(Y_1, T, P) = \frac{\alpha(Y_1, T, P)P}{\rho(Y_1, T, P)C_p(Y_1, T, P)}$$

qui est une fonction thermodynamique sans dimension,

$$c(Y_1, T, P) = \frac{1}{\sqrt{\frac{\partial \rho}{\partial P} - \frac{\alpha^2 T}{C_p}}}$$

qui est la vitesse du son dans les fluides 1 et 2, et

$$\Gamma(Y_1, T, P) = \frac{\rho(Y_1, T, P)c(Y_1, T, P)^2}{P}.$$

Les conditions aux limites sont données par (1.1.4) et (1.1.5). Un changement dans ces conditions aux limites induira un changement dans l'équation (1.2.4). La pression $P(t)$ est reliée aux champs de température thermodynamique $T(t, x)$ et de densité $\rho(t, x)$ via les équations d'état. La fonction $G(t, x)$ vérifie la condition de compatibilité de Neumann

$$\int_{\Omega} G(t, x) dx = 0 \quad (1.2.5)$$

(Voir [1] pour une démonstration complète)

1.3. LE SYSTÈME DIPHASIQUE BAS MACH POUR DEUX GAZ PARFAITS.

Les équations d'états pour deux gaz parfaits sont données par

$$\begin{cases} \rho_k(T, P) = \frac{P}{R_k T}, \\ \varepsilon_k(T, P) = \varepsilon_k(T) = \frac{R_k T}{\gamma_k - 1} \end{cases}$$

où $R_k > 0$ et $\gamma_k \in]1, 3]$ ($\gamma_k = 1,4$ pour l'air). La constante R_k est définie par $R_k = \mathcal{K}/m_k$ où $\mathcal{K} = 1,38062 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ est la constante de Boltzmann, m_k étant la masse atomique (ou moléculaire) du gaz k . On obtient alors que

$$\begin{cases} C_{p,k}(T, P) = C_{p,k} = \frac{\gamma_k R_k}{\gamma_k - 1}, \\ \alpha_k(T, P) = \alpha_k(T) = \frac{1}{T}, \\ \beta_k(T, P) = \beta_k = \frac{\gamma_k - 1}{\gamma_k}, \\ c_k(T, P) = c_k(T) = \sqrt{\gamma_k R_k T}, \\ \Gamma_k(T, P) = \Gamma_k = \gamma_k. \end{cases}$$

En posant

$$\begin{cases} C_p(Y_1) = Y_1 C_{p,1} + (1 - Y_1) C_{p,2}, \\ \gamma(Y_1) = Y_1 \gamma_1 + (1 - Y_1) \gamma_2, \\ R(Y_1) = Y_1 R_1 + (1 - Y_1) R_2, \end{cases}$$

le système diphasique bas Mach est donné par les deux systèmes couplés

$$\begin{cases} D_t Y_1 = 0, \\ C_p(Y_1) D_t T = R(Y_1) T \frac{P'(t)}{P(t)} + \frac{R(Y_1) T}{P(t)} \nabla \cdot [\lambda(Y_1) \nabla T] \end{cases} \quad (1.3.1)$$

et

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = G(t, x), \\ \rho D_t u = -\nabla \Pi(t, x) + \nabla \cdot \bar{\sigma}(Y_1) + \rho g \hat{z} \end{cases} \quad (1.3.2)$$

où

$$G(t, x) \equiv -\frac{P'(t)}{\gamma(Y_1)P(t)} + \frac{\gamma(Y_1) - 1}{\gamma(Y_1)P(t)} \cdot \nabla[\lambda(Y_1)\nabla T], \quad (1.3.3)$$

la pression $P(t)$ étant solution de l'équation différentielle ordinaire.

$$P'(t) = \beta_2^1 \frac{\int_{\Sigma(t)} \lambda(Y_1) \nabla T \cdot n_{1 \rightarrow 2} d\Sigma}{\int_{\Omega} \frac{dx}{\gamma(Y_1)}} \quad (1.3.4)$$

avec

$$\beta_2^1 = [\beta]_{\Sigma} \equiv \beta_1 - \beta_2 = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} - \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2}.$$

La fonction $G(t, x)$ définie avec (1.3.3) vérifie la condition de compatibilité de Neumann

$$\int_{\Omega} G(t, x) dx = 0. \quad (1.3.5)$$

Le système est fermé par les conditions aux limites

$$\begin{cases} \forall x \in \Sigma(t) : & u|_{\Sigma_1(t)} = u|_{\Sigma_2(t)}, \\ & \bar{\sigma}(Y_1)|_{\Sigma_1(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} = \bar{\sigma}(Y_1)|_{\Sigma_2(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2}, \\ & T|_{\Sigma_1(t)} = T|_{\Sigma_2(t)}, \\ & \lambda_1 \nabla T|_{\Sigma_1(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} = \lambda_2 \nabla T|_{\Sigma_2(t)} \cdot n_{1 \rightarrow 2} \end{cases} \quad (1.3.6)$$

et

$$\begin{cases} \forall x \in \partial\Omega : & u(t, x) = 0, \\ & \nabla T(t, x) \cdot n(x) = 0. \end{cases} \quad (1.3.7)$$

1.4. UN SCHÉMA TOTALEMENT CONSERVATIF.

On peut construire un schéma conservatif en masse et en énergie en remplaçant l'équation

$$C_p(Y_1)(\partial_t T + u \partial_x T) = R(Y_1)T \frac{P'(t)}{P(t)} + \frac{R(Y_1)T}{P(t)} \partial_x[\lambda(Y_1) \partial_x T]$$

par l'équation

$$\partial_t \rho + \partial_x(\rho u) = 0$$

sachant que le système conservatif récupéré est bien équivalent au système diphasique bas Mach (Pour la démonstration, voir [1]). On néglige par ailleurs la viscosité et la gravité.

Donc, le système diphasique bas Mach est constitué des systèmes :

$$\begin{cases} \partial_t(\rho Y_1) + \nabla \cdot (\rho u Y_1) = 0, \\ \partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho u) = 0, \end{cases} \quad (1.4.1)$$

et

$$\begin{cases} \nabla \cdot u = G(t, x), \\ \partial_t(\rho u) + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) = -\nabla \Pi(t, x), \end{cases} \quad (1.4.2)$$

où toutes les fonctions ont été définies plus haut.

1.5. À PROPOS DES SIMULATIONS NUMÉRIQUES.

Dans [1], deux schémas de discrétisation numérique du modèle sont proposés, un schéma en variables lagrangiennes, et un schéma en variables eulériennes. Le système diphasique bas Mach est écrit dans l'espace usuel (t, x) , nommé espace eulérien. En utilisant le changement de variables

$$dm = \rho dx,$$

on introduit une nouvelle variable m , appelée variable de masse. Ainsi, on définit l'espace des variables lagrangiennes qui est l'espace (t, m) .

Le domaine Ω est un intervalle ouvert du type $]A, B[$ ($A < B$) et l'interface $\Sigma(t)$ est un ensemble de points $\{\Sigma_1, \Sigma_2 \dots\}$ ne dépendant pas du temps.

Pour le système diphasique bas Mach, l'opérateur de la dérivée lagrangienne D_t est remplacé par l'opérateur classique ∂_t .

En introduisant ce changement de variable dans les équations (1.3.1) à (1.3.4), on trouve que le système unidimensionnel diphasique bas Mach pour deux gaz

parfaits écrit en variables lagrangiennes est défini par les systèmes

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_t Y_1 = 0, \\ C_p(Y_1) \partial_t T = R(Y_1) T \frac{P'(t)}{P(t)} + \partial_m [\eta(Y_1) \partial_m T] \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(a)} \\ \text{(b)} \end{array} \quad (1.5.1)$$

et

$$\left\{ \begin{array}{l} \partial_m u = \bar{G}(t, m), \\ \partial_t u = -\partial_m \Pi. \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{(a)} \\ \text{(b)} \end{array} \quad (1.5.2)$$

L'avantage de cette formulation est qu'au niveau discret, elle ne demande aucun traitement particulier pour le suivi de l'interface $\Sigma(t)$. L'espace lagrangien est très particulier puisque l'interface Σ entre les deux fluides y est fixe. La capture de l'interface Σ ne pose aucun problème.

Cependant, ce changement de variable n'est faisable que dans le cas unidimensionnel. Afin de pouvoir généraliser les simulations numérique à deux et trois dimensions dans l'avenir, Dellacherie propose un schéma numérique dans l'espace eulérien usuel (t, x) . Le domaine Ω est de nouveau $]A, B[$ ($A < B$), la topologie initiale des bulles est identique à celle dans l'espace lagrangien. La différence principale est que, en eulérien, l'interface $\Sigma(t) = \{\Sigma_1(t), \Sigma_2(t)\}$ n'est pas fixe, contrairement à l'interface lagrangienne.

Le suivi d'interface proposé dans [1] est basé sur une approximation assez grossière. L'interface $\Sigma(t)$ coïncide toujours avec les interfaces du maillage eulérien (voir Figure- 1.5.1-(a)). Ceci conduit à un manque de précision dans la résolution numérique du système.

Nous proposons dans ce mémoire une méthode eulérienne plus précise où l'interface $\Sigma(t)$ sera approximée par une fonction linéaire par morceaux. Dans cette approche, l'interface en tout temps n'est pas contrainte à coïncider avec les interfaces du maillage.

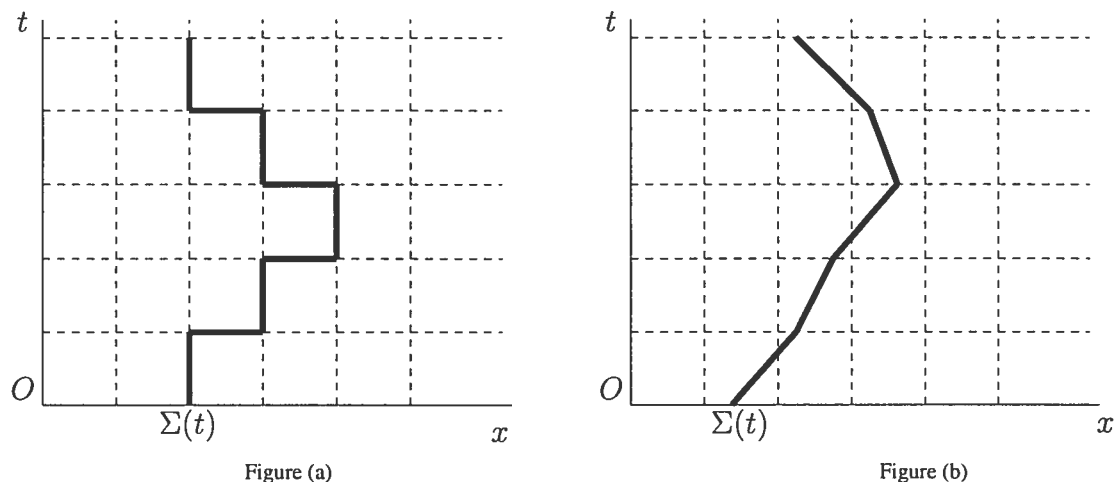


FIG. 1.5.1. Suivi de l'interface dans le plan (x, t)

Le reste de ce mémoire est organisé comme suit. L'objectif est de développer un schéma implicite d'ordre deux de suivi de front, pour obtenir une précision beaucoup plus grande.

Dans le deuxième chapitre, on explique l'idée principale de cet algorithme de suivi de front. Nous y décrivons différentes façons de gérer le front suivant sa position dans les mailles et la mise en oeuvre d'une méthode d'ordre 2, implicite, pour des problèmes sous forme conservative. La stratégie est illustrée et validée pour le problème d'advection à vitesse constante d'un scalaire avec une condition initiale discontinue.

Ce problème est particulièrement simple puisque la vitesse d'advection (et donc de déplacement de l'interface) est une constante donnée, indépendante de la solution pour le scalaire. En vue de l'application au modèle bas Mach diphasique, on teste l'approche pour un cas plus complexe, celui du problème de Stefan unidimensionnel. Ceci est fait dans le troisième chapitre. La vitesse de propagation est maintenant une fonction du saut des flux à l'interface. La précision du schéma est validée systématiquement.

Finalement, dans le quatrième chapitre, on combine tous les éléments testés dans les deux problèmes précédents pour proposer une méthode de suivi de front implicite, eulérienne, pour le système diphasique à faible nombre de Mach. La précision de la méthode est validée systématiquement. La méthode est globalement

conservative, eulérienne et sa précision équivaut à celle du schéma lagrangien initialement proposé dans [1]. On conclut en discutant de la possibilité de généraliser l'algorithme en plusieurs dimensions spatiales.

Chapitre 2

MÉTHODE DE SUIVI DE FRONT POUR L'ADVECTION

2.1. LE PROBLÈME D'ADVECTION

On considère le problème modèle

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + a \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0 & x \in \mathbb{R}, t \geq 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in \mathbb{R} \end{cases} \quad (2.1.1)$$

L'inconnue est la fonction u qui dépend de la coordonnée spatiale x et du temps t . Les données du problème sont la condition initiale $u_0(x)$ et la vitesse d'advection a . Pour observer la propagation d'un front, on choisit la condition initiale discontinue suivante :

$$u_0(x) = \begin{cases} \cos(\frac{\pi(1-x)}{2}) & \text{si } 0 < x < x_F, \\ -\cos(\frac{\pi x}{2}) & \text{si } x_F < x < L, \end{cases} \quad (2.1.2)$$

On vérifie aisément que la solution de (2.1.1) est

$$u(x, t) = u_0(x - at). \quad (2.1.3)$$

Une interprétation physique de l'équation (2.1.1) est la suivante : on considère un fleuve rectiligne représenté par la droite réelle et qui s'écoule à la vitesse a . La quantité $u(x, t)$ représente la concentration au point x et à l'instant t d'un produit polluant qui a été déversé accidentellement dans le fleuve à $t = 0$ selon le profil u_0 . Le polluant est transporté par l'écoulement et à un temps t fixé, la fonction $x \mapsto u(x, t)$ modélise la répartition de polluant le long du fleuve.

Pour simplifier, nous allons supposer que la donnée initiale u_0 est périodique (en espace) de période L si bien que nous pouvons nous restreindre à l'intervalle $x \in [0, L]$ et chercher la solution u satisfaisant

$$\begin{cases} \frac{\partial u}{\partial t}(x, t) + a \frac{\partial u}{\partial x}(x, t) = 0, & x \in [0, L], t \geq 0, \\ u(x, 0) = u_0(x) & x \in [0, L] \\ u(L, t) = u(0, t) & t \geq 0 \end{cases} \quad (2.1.4)$$

La dernière équation est la condition limite de périodicité.

2.2. L'ALGORITHME DE SUIVI DE FRONT

Dans la suite de ce travail on utilise les notations définies par ce qui suit :
Afin d'approcher numériquement la solution de chaque problème considéré, on se donne :

- * un entier N permettant de définir un pas d'espace $dx = \frac{L}{N}$ et un maillage uniforme de l'intervalle $[0, L]$ constitué des N points $x_i = (i - \frac{1}{2})dx$, $1 \leq i \leq N$;
- * un pas de temps dt permettant de construire la suite d'instants discrets $t^n = n dt$ pour $n \geq 0$.

Les indices d'espace au centre des mailles et aux interfaces du maillage sont respectivement notées i et $i + \frac{1}{2}$, $i \in \{1 \dots N\}$.

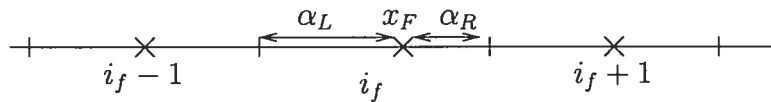


FIG. 2.2.1. Maillage.

Tout au long du schéma de discrétisation on notera : x_F^n la position du front au temps t^n et i_f^n le numéro de la cellule contenant le front. Le front ne se trouve pas forcément au milieu de la maille respective i_f .

Notons α_L la partie gauche de la maille i_f et α_R la partie droite, avec $\alpha_L + \alpha_R = dx$. Les mailles du maillage loin du front, sont appelées les *mailles régulières*, alors que celles qui se trouvent à gauche et à droite du front, sont appelées respectivement maille *gauche* et maille *droite*.

Étant donné U_i^n , notre objectif est d'évaluer des quantités U_i^{n+1} , $1 \leq i \leq N$ et $n \geq 0$, telles que

$$U_i^{n+1} \simeq u(x_i, t^{n+1}). \quad (2.2.1)$$

L'idée est d'approcher les dérivées partielles dans (2.1.4) pour les mailles loin de la discontinuité à l'aide de développement de Taylor et d'utiliser un algorithme conservatif de suivi de front pour les mailles proches et là où se trouve la discontinuité.

Pour la discrétisation temporelle on utilisera le schéma de Crank-Nicolson. Ce schéma est implicite. Il est d'une précision d'ordre 2 en temps. La discrétisation en espace se divise en deux parties :

I) Pour les mailles régulières on utilise le schéma de différences finies amont à variation totale décroissante (Upwind TVD) écrite sous forme conservative (voir [4] et [5]) :

$$\frac{U_i^{n+1} - U_i^n}{dt} = \frac{(DU)_{i-1/2} - (DU)_{i+1/2}}{dx} \quad (2.2.2)$$

où $(DU)_{i-1/2}$ est le flux à l'interface $i - \frac{1}{2}$, $(DU)_{i-1/2} = aU_{i-1/2}$.

Les approximations numériques de ces flux sont donnés par :

$$\begin{aligned} (DU)_{i-1/2} &= a \left(U_{i-1} + \frac{dx}{2} \sigma_{i-1/2} \right) \\ (DU)_{i+1/2} &= a \left(U_i + \frac{dx}{2} \sigma_{i+1/2} \right) \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

avec

$$\begin{aligned} \sigma_{i-1/2} &= \minmod \left(\frac{U_{i-1} - U_{i-2}}{dx}; \frac{U_i - U_{i-1}}{dx} \right) \\ \sigma_{i+1/2} &= \minmod \left(\frac{U_i - U_{i-1}}{dx}; \frac{U_{i+1} - U_i}{dx} \right) \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

où la fonction minmod de deux arguments est définie par

$$\minmod(a, b) = \begin{cases} a & \text{if } |a| < |b| \text{ et } ab > 0 \\ b & \text{if } |b| < |a| \text{ et } ab > 0 \\ 0 & \text{if } ab \leq 0 \end{cases} \quad (2.2.5)$$

Pour toutes les mailles régulières, on obtient alors le schéma ci-dessous :

$$U_i^{n+1} = U_i^n + \frac{dt}{2} \left[\frac{(DU)_{i-1/2}^{n+1} - (DU)_{i+1/2}^{n+1}}{dx} \right] + \frac{dt}{2} \left[\frac{(DU)_{i-1/2}^n - (DU)_{i+1/2}^n}{dx} \right] \quad (2.2.6)$$

Le schéma ci-dessus est un schéma précis d'ordre 2 en dehors des discontinuités. Si les $\sigma_{i\pm\frac{1}{2}}$ sont égaux à zéros, alors le schéma devient d'ordre 1. En fait, pour approximer les flux $(DU)_{i\pm\frac{1}{2}}$, on se sert de la solution U aux interfaces $i\pm\frac{1}{2}$. Cette solution est approximée en utilisant un fonction linéaire par morceaux. Les $\sigma_{i\pm\frac{1}{2}}$ sont les pentes de chaque morceau linéaire. Si ces pentes sont nulles, la fonction qui approxime devient une fonction constante par morceaux et donc l'ordre de précision baisse à l'ordre 1.

II) La tâche devient délicate pour les mailles proches du front et surtout pour les mailles *gauche* et *droite*.

On veut éviter le problème de l'écrasement des mailles, décrit comme suit.

Suivant la position du front par rapport aux interfaces du maillage eulérien, les parties α_L et α_R peuvent devenir très petites et même zéro. Les flux $F = aU$ sont calculés aux interfaces et le schéma de discrétisation demande une différence de flux à travers ces interfaces. Cette différence peut donc devenir vraiment petite, voir nulle, ce qui entraîne d'importants effets de cancellation, résultant en une grande imprécision numérique.

Sans perdre de généralité, supposons que la vitesse de propagation a est positive $a > 0$. Suivant la position du front par rapport aux interfaces du maillage, on considère les deux cas possibles :

CAS A : Entre le temps t^n et le temps t^{n+1} , le front ne change pas de maille.

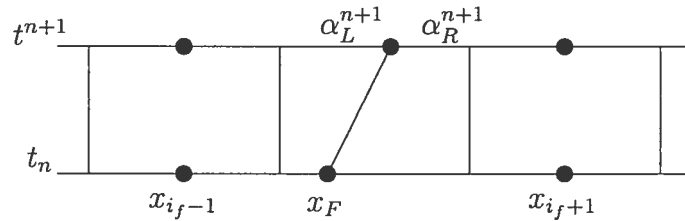


FIG. 2.2.2. CAS A : le front ne change pas de maille.

On va combiner deux formulations numériques différentes dans ces mailles, pour des raisons expliquées plus tard.

2.2.1. Formulation 1

Dans la formulation 1 on effectue des bilans conservatifs de type volume finis dans chacune des mailles :

$$i_f^{n+1} - 1, \quad L^{n+1} = \text{maille gauche}, \quad R^{n+1} = \text{maille droite}, \quad i_f^{n+1} + 1.$$

On reprend ici l'équation d'advection (2.1.1) écrit sous sa forme conservative

$$U_t + F(U)_x = 0 \quad (2.2.7)$$

avec $F(U) = aU$.

On écrit les bilans conservatifs uniquement dans les mailles $i_f^{n+1} - 1$ et L^{n+1} . On nomme aussi ces mailles $C_{i_f^{n+1}-1}$ et $C_{L^{n+1}}$. Les bilans conservatifs dans les mailles R^{n+1} et $i_f^{n+1} + 1$ sont symétriques avec les bilans dans les mailles $i_f^{n+1} - 1$ et L^{n+1} .

1) Bilan conservatif dans la maille $C_{i_f^{n+1}-1}$:

On écrit ce bilan à partir de l'intégration de (2.2.7) dans la maille rectangulaire $C_{i_f^{n+1}-1}$. Alors,

$$\int \int_{C_{i_f^{n+1}-1}} (U_t + F(U)_x) dx dt = 0$$

D'où, en utilisant le théorème de Green,

$$- \int_{\partial C_{i_f^{n+1}-1}} (U dx - F(U) dt) = 0$$

c'est à dire

$$\begin{aligned} & - \int_{x_{i_f-3/2}}^{x_{i_f-1/2}} U(x, t^n) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt \\ & + \int_{x_{i_f-3/2}}^{x_{i_f-1/2}} U(x, t^{n+1}) dx - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-3/2}, t)) dt = 0 \end{aligned}$$

d'où

$$\begin{aligned} & \int_{x_{i_f-3/2}}^{x_{i_f-1/2}} U(x, t^{n+1}) dx = \int_{x_{i_f-3/2}}^{x_{i_f-1/2}} U(x, t^n) dx \\ & + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-3/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt \end{aligned}$$

et donc

$$\begin{aligned}\tilde{U}_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} dx &= \tilde{U}_{i_f^n-1}^n dx \\ &+ \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-3/2}, t)) dt - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt\end{aligned}$$

où $\tilde{U}_{i_f^{n+1}-1}^{n+1}$ et $\tilde{U}_{i_f^n-1}^n$ sont les valeurs intégrales moyennes.

On note $U_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} \simeq \tilde{U}_{i_f^{n+1}-1}^{n+1}$, $U_{i_f^n-1}^n \simeq \tilde{U}_{i_f^n-1}^n$ les approximations numériques des valeurs intégrales moyennes et $(DU)_{i_f-3/2} \simeq \frac{1}{dt} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-3/2}, t)) dt$ l'approximation numérique de l'intégrale de flux. Alors, le bilan conservatif dans la maille $C_{i_f^{n+1}-1}$ s'écrit de la façon suivante :

$$U_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} = U_{i_f^n-1}^n + \frac{dt}{dx} [(DU)_{i_f-3/2} - (DU)_{i_f-1/2}]$$

2) Bilan conservatif dans la maille $C_{L^{n+1}}$:

De la même façon, on effectue l'intégration de (2.2.7) dans la maille $C_{L^{n+1}}$. Alors,

$$\int \int_{C_{L^{n+1}}} (U_t + F(U)_x) dx dt = 0$$

D'où, en utilisant le théorème de Green,

$$- \int_{\partial C_{L^{n+1}}} (U dx - F(U) dt) = 0$$

c'est à dire

$$\begin{aligned}& - \int_{x_{i_f-1/2}}^{x_F} U(x, t^n) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_F, t)) dt \\ & + \int_{x_{i_f-1/2}}^{x_F} U(x, t^{n+1}) dx - \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt = 0\end{aligned}$$

Or, le flux à travers le front x_F est zéro, d'où

$$\int_{x_{i_f-1/2}}^{x_F} U(x, t^{n+1}) dx = \int_{x_{i_f-1/2}}^{x_F} U(x, t^n) dx + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt - 0$$

et donc

$$\tilde{U}_L^{n+1} \alpha_L^{n+1} = \tilde{U}_L^n \alpha_L^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt$$

où \tilde{U}_L^{n+1} et \tilde{U}_L^n sont les valeurs intégrales moyennes.

On note $U_L^{n+1} \simeq \tilde{U}_L^{n+1}$, $U_L^n \simeq \tilde{U}_L^n$ les approximations numériques des valeurs intégrales moyennes et $(DU)_{i_f-1/2} \simeq \frac{1}{dt} \int_{t^n}^{t^{n+1}} F(U(x_{i_f-1/2}, t)) dt$ l'approximation

numérique de l'intégrale de flux. Alors, le bilan conservatif dans la maille $C_{L^{n+1}}$ s'écrit de la façon suivante :

$$U_L^{n+1} = \frac{\alpha_L^n}{\alpha_L^{n+1}} U_L^n + \frac{dt}{\alpha_L^{n+1}} (DU)_{i_f-1/2}$$

À partir de ces bilans et en utilisant le schéma de Crank-Nicolson pour les flux numériques, on déduit la solution au temps t^{n+1} pour les mailles suivantes :

a) Pour la maille $i_f^{n+1} - 1$,

$$\begin{aligned} U_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} = & U_{i_f-1}^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} - (DU)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1})] \\ & + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f-3/2}^n - (DU)_{i_f-1/2}^n)] \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

b) Pour la maille L^{n+1} ,

$$U_L^{n+1} = \frac{\alpha_L^n}{\alpha_L^{n+1}} U_L^n + \frac{dt}{2\alpha_L^{n+1}} \left[(DU)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1} + (DU)_{i_f-1/2}^n \right] \quad (2.2.9)$$

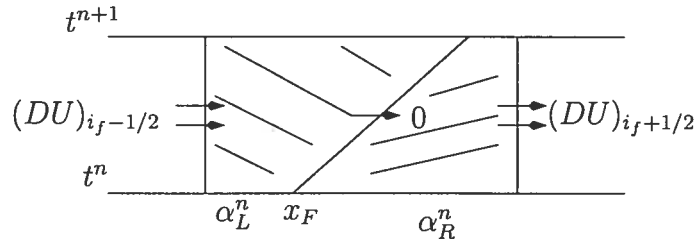


FIG. 2.2.3. Bilans conservatifs *gauche* et *droite*.

c) Pour la maille R^{n+1} ,

$$U_R^{n+1} = \frac{\alpha_R^n}{\alpha_R^{n+1}} U_R^n - \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} \left[(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + (DU)_{i_f+1/2}^n \right] \quad (2.2.10)$$

d) Pour la maille $i_f^{n+1} + 1$,

$$\begin{aligned} U_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} = & U_{i_f+1}^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DU)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1})] \\ & + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f+1/2}^n - (DU)_{i_f+3/2}^n)] \end{aligned} \quad (2.2.11)$$

Le problème de cette formulation 1 est dans la limite où α_L ou α_R devient très petit, voir nul, à cause des divisions dans les expressions pour U_L^{n+1} et U_R^{n+1} .

2.2.2. Formulation 2

Ici on introduit deux nouvelles valeurs de la solution U qu'on les appelle U_{EL} et U_{ER} qui sont respectivement les valeurs pour les mailles *équivalente-gauche* (l'union de la maille *gauche* avec la maille $i_f - 1$) et *équivalente-droite* (l'union de la maille *droite* avec la maille $i_f + 1$).

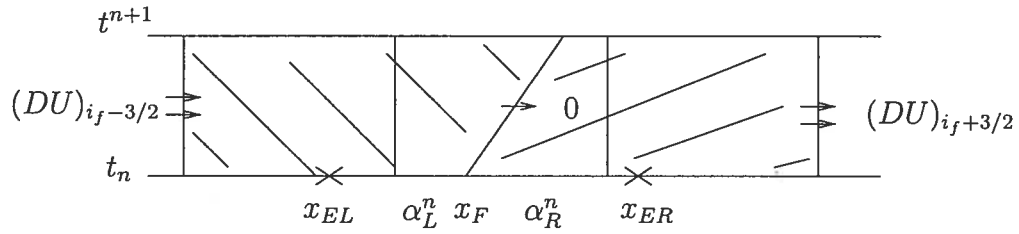


FIG. 2.2.4. Bilans conservatifs *équivalents*.

Dans la formulation 2 on effectue des bilans conservatifs de type volume finis dans les mailles *équivalente-gauche* et *équivalente-droite*. On obtient les solutions U_{EL}^{n+1} et U_{ER}^{n+1} au temps t^{n+1} :

$$U_{EL}^{n+1} = \frac{\alpha_L^n U_L^n + dx U_{i_f-1}^n + \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f-3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f-3/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})}$$

$$U_{ER}^{n+1} = \frac{\alpha_R^n U_R^n + dx U_{i_f+1}^n - \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f+3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f+3/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

On calcule alors la solution pour les mailles *gauche* et *droite* par intégration numérique des polynômes $P_L(x_{EL}, x_{i_f-2})$ et $P_R(x_{ER}, x_{i_f+2})$.

Les polynômes P_L et P_R sont les polynômes d'interpolation par respectivement les points à gauche et à droite du front.

$$P_L(x) = P[(x_{EL}, U_{EL}) \quad (x_{i_f-2}, U_{i_f-2})]$$

$$P_R(x) = P[(x_{ER}, U_{ER}) \quad (x_{i_f+2}, U_{i_f+2})]$$

On effectue l'interpolation polynômiale :

$$P_L(x) = U_{i_f-2} \frac{(x - x_{EL})}{(x_{i_f-2} - x_{EL})} + U_{EL} \frac{(x - x_{i_f-2})}{(x_{EL} - x_{i_f-2})}$$

et

$$P_R(x) = U_{i_f+2} \frac{(x - x_{ER})}{(x_{i_f+2} - x_{ER})} + U_{ER} \frac{(x - x_{i_f+2})}{(x_{ER} - x_{i_f+2})}$$

et par la suite, on calcule

$$U_L^{n+1} = \frac{1}{\alpha_L^{n+1}} \int_{-\alpha_L^{n+1}}^0 P_L^{n+1}(x) dx$$

$$U_R^{n+1} = \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \int_0^{\alpha_R^{n+1}} P_R^{n+1}(x) dx$$

On obtient donc, après calculs

$$\begin{aligned} U_L^{n+1} &= E_L^{n+1} U_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1} U_{i_f-2}^{n+1} \\ U_R^{n+1} &= E_R^{n+1} U_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1} U_{i_f+2}^{n+1} \end{aligned}$$

avec E_L , E_R , F_L et F_R définis comme suit :

$$\begin{aligned} E_L^{n+1} &= (3dx + \alpha_L^{n+1}) / (2dx + \alpha_L^{n+1}) \\ F_L^{n+1} &= dx / (2dx + \alpha_L^{n+1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} E_R^{n+1} &= (3dx + \alpha_R^{n+1}) / (2dx + \alpha_R^{n+1}) \\ F_R^{n+1} &= dx / (2dx + \alpha_R^{n+1}) \end{aligned}$$

En connaissant U_{EL}^{n+1} , U_{ER}^{n+1} , U_L^{n+1} et U_R^{n+1} , on obtient :

$$U_{i_f-1}^{n+1} = \frac{(dx + \alpha_L^{n+1})U_{EL}^{n+1} - \alpha_L^{n+1}U_L^{n+1}}{dx}$$

$$U_{i_f+1}^{n+1} = \frac{(dx + \alpha_R^{n+1})U_{ER}^{n+1} - \alpha_R^{n+1}U_R^{n+1}}{dx}$$

La formulation 2 est robuste. Elle est intéressante à considérer puisque elle n'a pas la contrainte de division par un nombre (α_L ou α_R) très petit ou zéro. Par contre, elle est moins précise que la formulation 1.

2.2.3. Formulation combinée

On met en oeuvre une formulation combinée obtenue comme une moyenne pondérée entre la formulation 1 et la formulation 2. L'idée est de profiter au maximum de la formulation 1 qui est plus précise tant qu'aucune fraction de maille α_L ou α_R n'est petite ou nulle. Si cette condition est satisfaite, la formulation combinée donne plus de poids à la formulation 1, sinon, la formulation 2 est plus importante.

Pour le côté *gauche*

$$\left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right) (\text{Formulation 1}) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)\right] (\text{Formulation 2})$$

Pour le côté *droite*

$$\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right) (\text{Formulation 1}) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)\right] (\text{Formulation 2})$$

On obtient donc

$$\begin{aligned} U_{i_f-1}^{n+1} = & \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right) (U_{i_f-1}^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} - (DU)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1}] \\ & + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^n-3/2}^n - (DU)_{i_f^n-1/2}^n]) \\ & + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)\right] \left(\frac{(dx + \alpha_L^{n+1})U_{EL}^{n+1} - \alpha_L^{n+1}U_L^{n+1}}{dx}\right) \end{aligned}$$

$$U_{EL}^{n+1} = \frac{\alpha_L^n U_L^n + dx U_{i_f-1}^n + \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n-3/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})}$$

$$\begin{aligned} U_L^{n+1} = & \left(\frac{\alpha_L^n}{dx} U_L^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n-1/2}^n]\right) \\ & + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)\right] (E_L^{n+1} U_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1} U_{i_f-2}^{n+1}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_R^{n+1} &= \left(\frac{\alpha_R^n}{dx} U_R^n - \frac{dt}{2dx} \left[(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n+1/2}^n \right] \right) \\
&\quad + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) \right] (E_R^{n+1} U_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1} U_{i_f+2}^{n+1}) \\
U_{ER}^{n+1} &= \frac{\alpha_R^n U_R^n + dx U_{i_f+1}^n - \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n+3/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})} \\
U_{i_f+1}^{n+1} &= \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) (U_{i_f+1}^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DU)_{i_f^n+3/2}^n]) \\
&\quad + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^n+1/2}^n - (DU)_{i_f^n+3/2}^n] \\
&\quad + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) \right] \left(\frac{(dx + \alpha_R^{n+1}) U_{ER}^{n+1} - \alpha_R^{n+1} U_R^{n+1}}{dx} \right)
\end{aligned}$$

CAS B : Entre le temps t^n et le temps t^{n+1} , le front change de maille à droite :

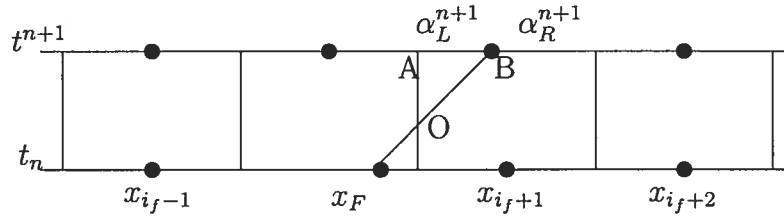


FIG. 2.2.5. CAS B : le front change de maille à droite.

Dans le cas où le front change de maille à droite, il peut arriver que le front soit très proche de l'interface $i_f - \frac{1}{2}$. Par conséquent le triangle OAB a une aire très petite. Si on doit utiliser une formulation combinée analogue avec le CAS A, on doit effectuer un bilan conservatif sur ce triangle. Ceci peut résulter en des imprecisions à cause de la petite taille du triangle.

Pour éviter ceci on utilise uniquement la formulation 2 dans les mailles à gauche du front et la formulation combinée dans les mailles à droite du front. Ceci nous conduit à considérer uniquement un bilan conservatif pour la maille *équivalente-gauche* (EL^{n+1}) et à droite les bilans conservatifs sur les mailles R^{n+1} , ER^{n+1}

(équivalente-droite) et $i_f^{n+1} + 1$. En utilisant le schéma de Crank-Nicolson, on obtient pour le côté gauche :

Bilan pour la maille *équivalente-gauche* :

$$U_{EL}^{n+1} = \frac{\alpha_L^n U_L^n + \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n-1/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})}$$

On obtient $U_{i_f-1}^{n+1}$ et U_L^{n+1} par la formulation 2

$$U_{i_f-1}^{n+1} = \frac{(dx + \alpha_L^{n+1})U_{EL}^{n+1} - \alpha_L^{n+1}U_L^{n+1}}{dx}$$

$$U_L^{n+1} = E_L^{n+1}U_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1}U_{i_f-2}^{n+1}$$

Pour le côté droit, on utilise donc la formulation combinée.

Formulation 1, pour la maille R^{n+1} ,

$$U_R^{n+1} = \frac{\alpha_R^n}{\alpha_R^{n+1}}U_R^n + \frac{dx}{\alpha_R^{n+1}}U_{i_f+1}^{n+1} - \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} \left[(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n+3/2}^n \right]$$

Formulation 1, pour la maille $i_f^{n+1} + 1$,

$$\begin{aligned} U_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} = & U_{i_f+2}^n + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DU)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1}] \\ & + \frac{dt}{2dx} [(DU)_{i_f^n+3/2}^n - (DU)_{i_f^n+5/2}^n] \end{aligned}$$

Pour la formulation 2, on obtient pour la maille ER^{n+1} ,

$$U_{ER}^{n+1} = \frac{\alpha_R^n U_R^n + dx U_{i_f+1}^n + dx U_{i_f+2}^n - \frac{dt}{2} ((DU)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} + (DU)_{i_f^n+5/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

$$U_{i_f+1}^{n+1} = \frac{(dx + \alpha_R^{n+1})U_{ER}^{n+1} - \alpha_R^{n+1}U_R^{n+1}}{dx}$$

$$U_R^{n+1} = E_R^{n+1}U_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1}U_{i_f+2}^{n+1}$$

On peut écrire donc la formulation combinée de la même façon que dans le CAS A. Ceci complète la description de l'algorithme de suivi de front pour le problème d'advection.

2.3. RÉSULTATS NUMÉRIQUES ET CONCLUSIONS

On écrit un script Matlab qui comprend 4 parties :

1. initialisation des paramètres physiques : vitesse de propagation $a = 1$, longueur du domaine de calcul $L = 1$, temps maximum de simulation $T_{final} = 1$ et condition initiale.

$$u_0(x) = \begin{cases} \cos(\frac{\pi(1-x)}{2}) & \text{si } 0 < x < x_F, \\ -\cos(\frac{\pi x}{2}) & \text{si } x_F < x < L, \end{cases} \quad (2.3.1)$$

2. initialisation des paramètres numériques : on choisit N et on en déduit dx

$$dx = L/N,$$

puis on choisit le nombre de Courant CFL et on en déduit le pas de temps dt .

$$dt = CFL * dx$$

3. boucle en temps : on initialise $(U_i^0)_{0 \leq i \leq N}$ puis on évalue $(U_i^{n+1})_{0 \leq i \leq N}$ en fonction de $(U_i^n)_{0 \leq i \leq N}$ tant que $t^n \leq T_{final}$.

4. visualisation graphique des résultats : on affiche sur une même fenêtre la solution exacte et la solution approchée. La discontinuité est en mouvement avec une vitesse a .

On représente ici des solutions pour différentes condition de CFL . Ce nombre est tel que $0 < CFL \leq 1$. Le schéma de discrétisation numérique ne fonctionne que si le front ne traverse pas plus qu'une maille à la fois.

A) Solution ordre 1 sans suivi de front.

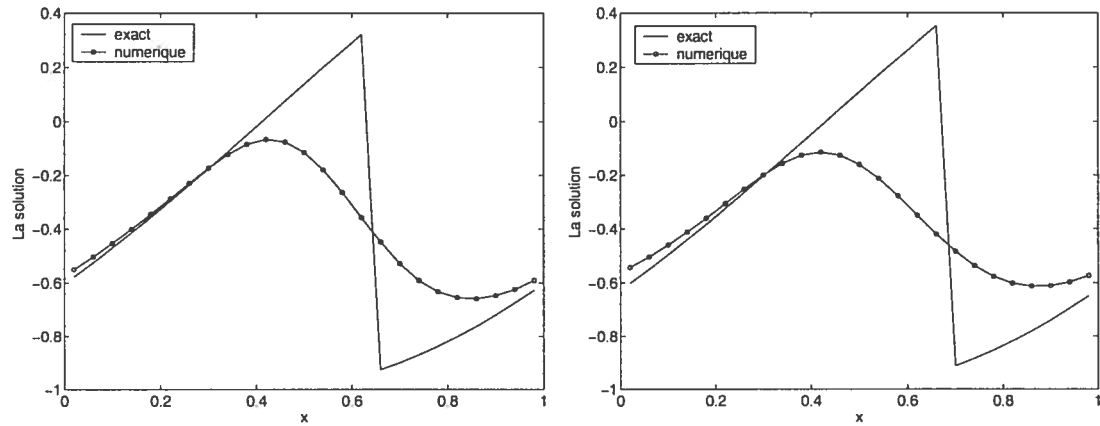


FIG. 2.3.1. Solution sans suivi de front, ordre de précision 1, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

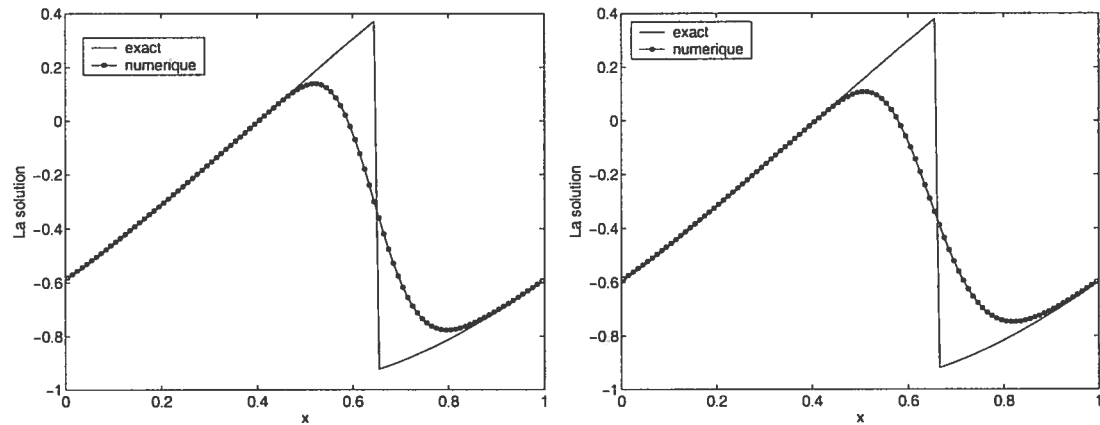


FIG. 2.3.2. Solution sans suivi de front, ordre de précision 1, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

En raffinant le maillage, on observe une amélioration de la précision de la solution numérique, mais elle reste très lisse autour de la discontinuité.

B) Solution ordre 2 sans suivi de front.

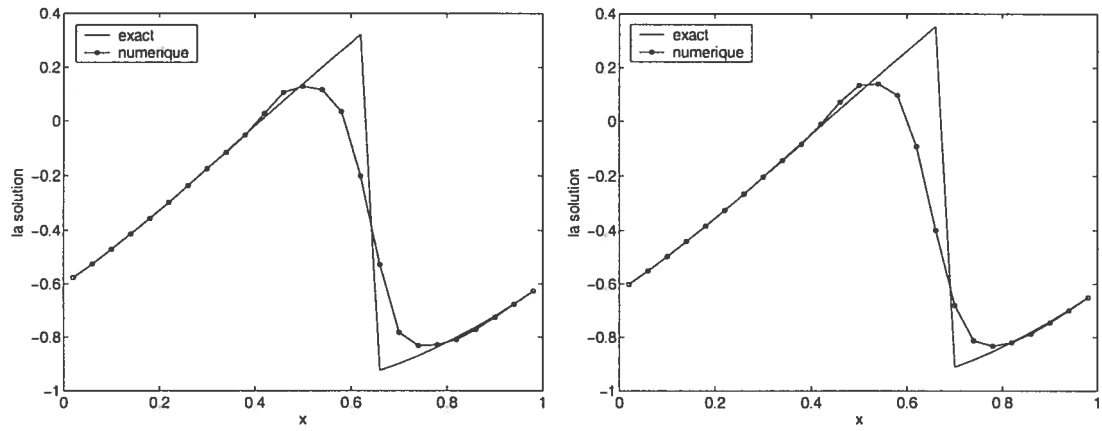


FIG. 2.3.3. Solution sans suivi de front, ordre de précision 2, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

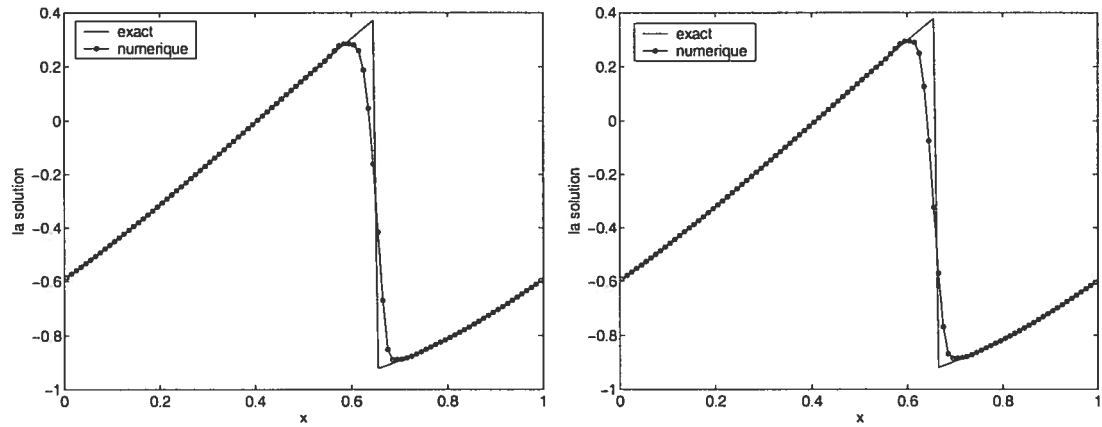


FIG. 2.3.4. Solution sans suivi de front, ordre de précision 2, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

En comparant le schéma d'ordre 1 avec le schéma d'ordre 2, on observe déjà une amélioration de la précision. En utilisant le schéma d'ordre 2, la solution numérique est nettement plus précise. Remarquons ici que les deux schémas sans suivi de front utilisés font disparaître la discontinuité en la lissant.

C) Solution ordre 1 avec suivi de front.

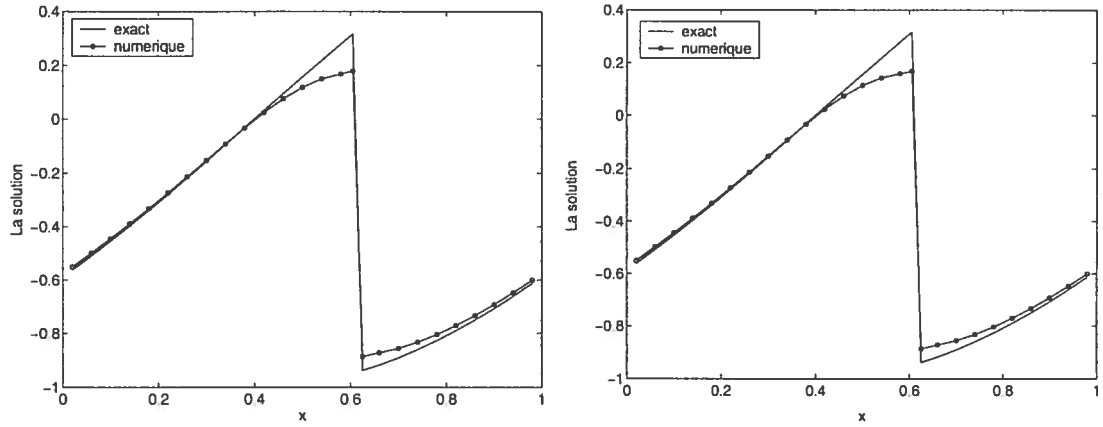


FIG. 2.3.5. Solution avec suivi de front, ordre de précision 1, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

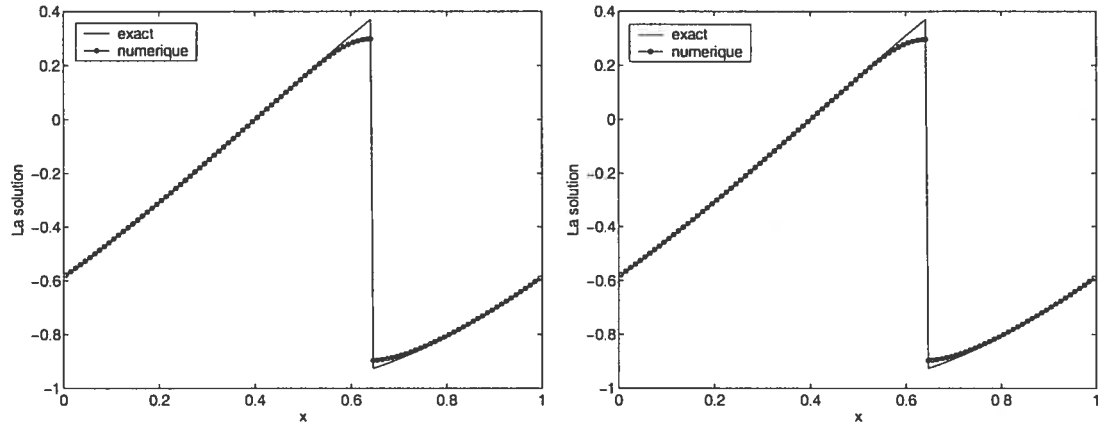


FIG. 2.3.6. Solution avec suivi de front, ordre de précision 1, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

D) Solution ordre 2 avec suivi de front.

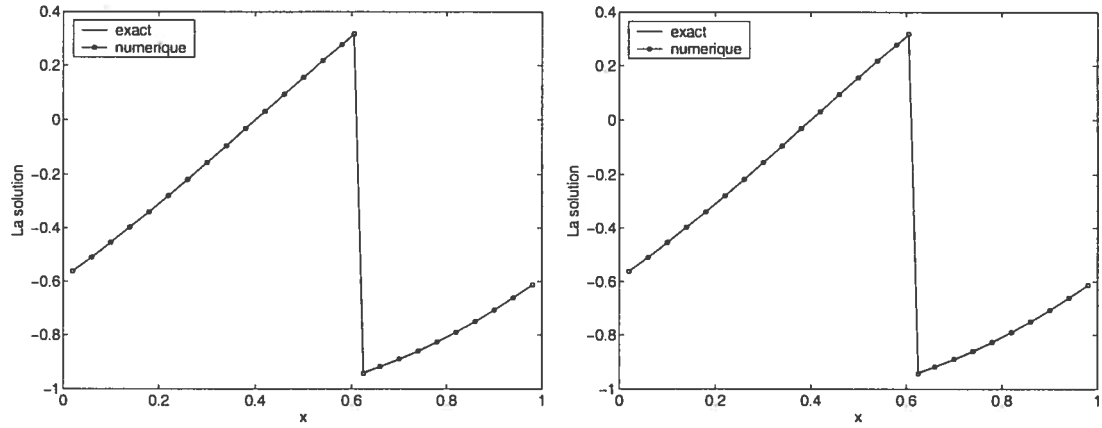


FIG. 2.3.7. Solution avec suivi de front, ordre de précision 2, $N = 25$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

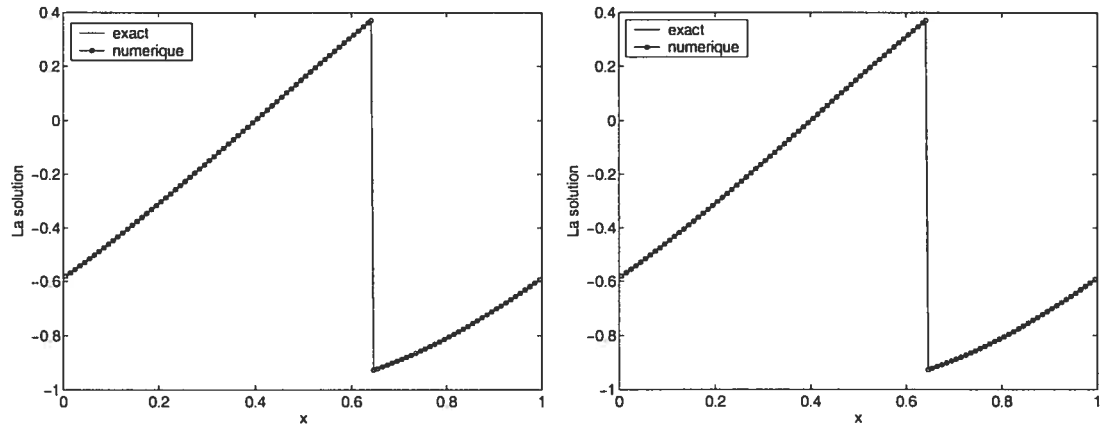


FIG. 2.3.8. Solution avec suivi de front, ordre de précision 2, $N = 100$, $a = 1$, figure à gauche $CFL = 0.3$, figure à droite $CFL = 0.8$, $T_{Final} = 0.4$.

De façon similaire en utilisant un schéma précise d'ordre 2, on observe une amélioration de la précision de la solution du problème (2.1.1)-(2.1.2). Contrairement aux schémas sans suivi de front, les deux schémas avec suivi de front utilisés conservent la discontinuité. La condition initiale étant discontinue, l'advection à une vitesse a constante résulte en une solution discontinue pour $t > 0$. L'approche

numérique avec suivi de front est donc très proche de la solution exacte.

On observe maintenant l'ordre de la convergence des schémas avec suivi de front. Étant donné qu'on connaît la solution exacte du problème (2.1.1)-(2.1.2), on fait une étude de l'erreur en comparant la solution numérique avec la solution exacte.

A) Tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx .

dx	Norme L_1 de l'erreur, ordre 1, CFL=0.3	Norme L_1 de l'erreur, ordre 2, CFL=0.3
1/50	1.0982e-002	8.7011e-005
1/100	5.7057e-003	2.1825e-005
1/200	2.9343e-003	5.3976e-006
1/400	1.4970e-003	1.3552e-006
1/800	7.5914e-004	3.4121e-007
dx	Norme L_1 de l'erreur, ordre 1, CFL=0.8	Norme L_1 de l'erreur, ordre 2, CFL=0.8
1/50	1.1315e-002	4.9955e-005
1/100	5.8339e-003	1.2127e-005
1/200	2.9830e-003	2.9729e-006
1/400	1.5149e-003	7.0461e-007
1/800	7.6574e-004	1.6682e-007

TAB. 2.3.1. Norme L_1 de l'erreur, schéma avec suivi de front

On observe pour le schéma d'ordre 1 que l'erreur diminue proportionnellement à dx , par contre pour le schéma d'ordre 2, l'erreur diminue plus vite, comme dx^2 .

B) Graphique de l'erreur.

Dans les deux choix de la condition du CFL , au schéma d'ordre 1 correspond une pente presque égale à 1 (pour $CFL = 0.3$, $P_1 = 0.9802$ et pour $CFL = 0.8$, $P_1 = 0.9987$) et au schéma d'ordre 2 correspond une pente presque égale à 2 (pour $CFL = 0.3$, $P_2 = 1.9982$ et pour $CFL = 0.8$, $P_2 = 2.0118$). Ceci confirme l'ordre théorique des méthodes considérées.

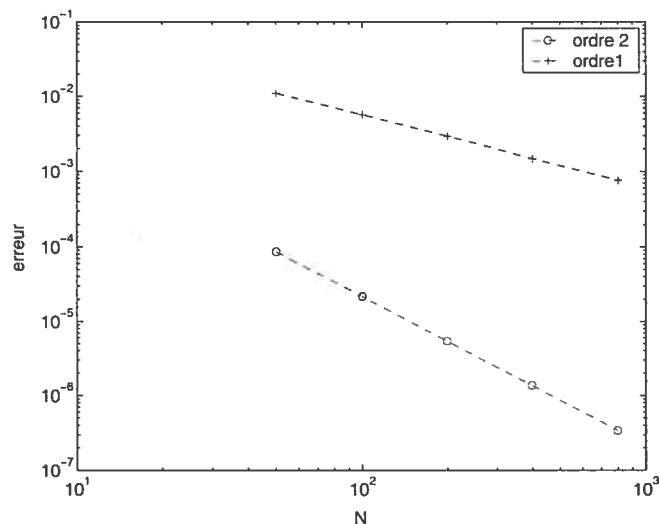


FIG. 2.3.9. Erreur, $CFL = 0.3$, $a = 1$ et $T_{Final} = 0.4$.

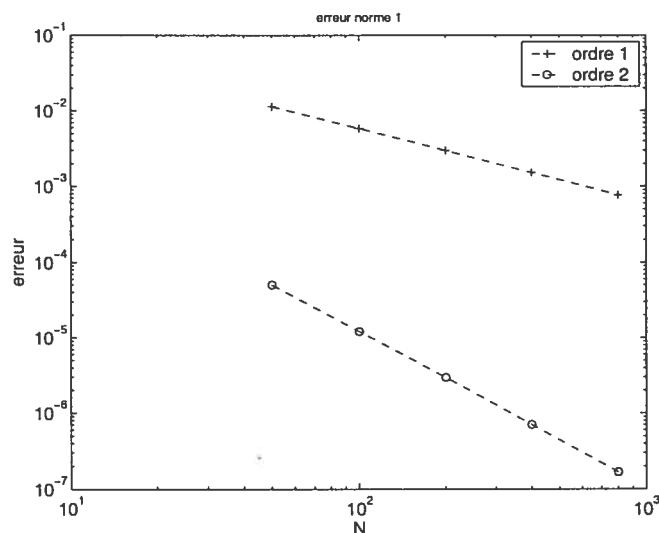


FIG. 2.3.10. Erreur, $CFL = 0.8$, $a = 1$ et $T_{Final} = 0.4$.

Dans ce chapitre, on a donc expliqué l'idée principale de l'algorithme de suivi de front. Nous y avons décrit différentes façons de gérer le front suivant sa position dans les mailles et la mise en oeuvre d'une méthode d'ordre 2, implicite, pour des problèmes sous forme conservative.

La stratégie illustrée dans ce chapitre constitue l'idée de base pour des algorithmes de suivi de front pour des problèmes plus complexes que celui de l'advection. En vue de l'application au modèle bas Mach diphasique, on va tester ensuite l'approche pour un cas plus complexe, celui du problème de Stefan unidimensionnel.

Chapitre 3

MÉTHODE DE SUIVI DE FRONT IMPLICITE POUR LE PROBLÈME DE STEFAN

3.1. LE PROBLÈME DE STEFAN

Le problème de Stefan décrit l'évolution en temps d'une interface liquide-solide dans des problèmes avec changement de phase. Le problème consiste à trouver la température et la position de l'interface entre deux phases d'un matériel pur. La simulation numérique de ce problème est plus difficile que celle du problème d'advection à cause du couplage non-trivial entre la vitesse de propagation de l'interface et la solution.

Soit Ω le domaine du matériel, pour lequel en chaque point le matériel est soit liquide soit solide. La région où le matériel est liquide est notée Ω_1 et la région où le matériel est solide est notée Ω_2 . Soit V la vitesse à laquelle l'interface se déplace.

Les équations qui modélisent ce problème sont les suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{ll} C_1 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(k_1 \frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_1 \\ C_2 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(k_2 \frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_2 \end{array} \right. \quad (3.1.1)$$

Au front, la vitesse V satisfait la condition suivante :

$$LV = - \left[k_1 \frac{dT_{liq}}{dx} - k_2 \frac{dT_{sol}}{dx} \right] \quad (3.1.2)$$

L est la chaleur latente de solidification, C_1 , C_2 sont les capacités volumiques de la chaleur, k_1 et k_2 sont les coefficients de diffusion thermique respectivement dans les phases 1 et 2.

La température au front est donnée. On la note T_F . Elle est constante et correspond à la température de changement de phase du matériel.

La position du front est régie par l'équation :

$$\frac{dx_F}{dt} = V \quad (3.1.3)$$

3.2. MÉTHODE DE RÉOLUTION DU PROBLÈME DE STEFAN.

La mise en oeuvre de cette méthode inclut les étapes suivantes :

1. Discrétisation temporelle et spatiale.
2. Algorithme de suivi du front.
3. Algorithme itératif.
4. Résultats numériques et conclusion.

3.2.1. Discrétisation temporelle et spatiale

On utilise le maillage spatio - temporel défini dans le chapitre 2.

$x_i = (i - \frac{1}{2})dx$, $1 \leq i \leq N$ et $t^n = n dt$ pour $n \geq 0$.

On considère le cas où $C_1 = 1$, $C_2 = 1$, $k_1 = 1$, $k_2 = 1$ et $L = 1$.

Discrétisation temporelle

Pour la discrétisation temporelle on utilise le schéma de Crank-Nicolson.

Ce schéma est implicite. Il est d'une précision d'ordre 2 en temps.

$$T_i^{n+1} = T_i^n + \frac{dt}{2} \left[\frac{(Flux)_{i+1/2}^{n+1} - (Flux)_{i-1/2}^{n+1}}{dx} \right] + \frac{dt}{2} \left[\frac{(Flux)_{i+1/2}^n - (Flux)_{i-1/2}^n}{dx} \right]$$

où $(Flux)_{i-1/2} = \frac{dT}{dx}(x_{i-1/2})$.

Discrétisation en espace

Pour les mailles régulières (ne contenant pas le front), on utilise le schéma de

différences finies à trois points. Les flux $(Flux)_{i-1/2}$ sont approximatés par :

$$(Flux)_{i-1/2} = \frac{dT}{dx}(x_{i-1/2}) \cong \frac{T_i - T_{i-1}}{dx}$$

$\frac{dT}{dx}(x_{i-1/2})$ est le flux à l'interface $i - 1/2$. Pour toutes les mailles régulières, on obtient donc le schéma ci-dessous :

$$T_i^{n+1} - \frac{dt}{2} \left(\frac{T_{i-1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i+1}^{n+1}}{dx^2} \right) = T_i^n + \frac{dt}{2} \left(\frac{T_{i-1}^n - 2T_i^n + T_{i+1}^n}{dx^2} \right) \quad (3.2.1)$$

La discrétisation spatiale est plus délicate pour les mailles proches du front et surtout pour les mailles *gauche* et *droite*.

Comme dans le cas d'advection, on veut éviter "le problème des écrasements des mailles", tel qu'observé au chapitre précédent. On doit gérer les cas où les parties α_L et α_R deviennent très petites ou zéro.

3.2.2. Algorithme de suivi de front

Dans tout ce chapitre, on écrit les équations pour le cas où la vitesse de propagation de l'interface est positive. Si la vitesse est négative, on utilise des équations symétriques à celles utilisés dans le cas où $V > 0$.

3.2.2.1. Bilans conservatifs pour les mailles proches du front

CAS A : Le front ne change pas de maille

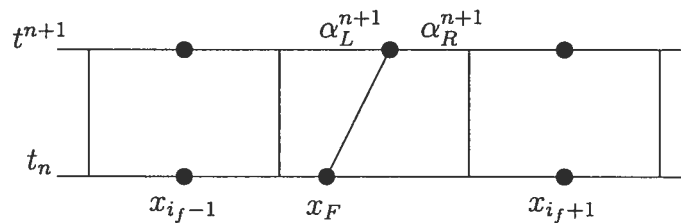


FIG. 3.2.1. CAS A : le front ne change pas de maille.

On effectue des bilans conservatifs pour chacune des mailles suivantes :

$$i_f^{n+1} - 1, \quad L^{n+1} = \text{maille gauche}, \quad R^{n+1} = \text{maille droite}, \quad i_f^{n+1} + 1.$$

Similairement au chapitre 2, on effectue l'intégration numérique dans les mailles ci-haut et on utilise le schéma de Crank-Nicolson pour approcher les flux. On a :

a) Pour la maille $i_f^{n+1} - 1$,

$$\begin{aligned} dxT_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} - dxT_{i_f^n-1}^n &= \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1}] \\ &+ \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^n-1/2}^n - (DT)_{i_f^n-3/2}^n] \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

où $(DT)_{i_f^n-1/2}$ est la discrétisation spatiale du flux $\frac{dT}{dx}$ au point $i_f^n - 1/2$ du maillage.

b) Pour la maille L^{n+1} ,

Ici, contrairement au problème d'advection, le flux au front n'est pas zéro. En plus il y a une discontinuité du flux à l'interface. On note $(DT)_{F,L}$ le flux au front à gauche, et $(DT)_{F,R}$ le flux au front à droite. La vitesse de propagation est maintenant une fonction du saut des flux à l'interface F . On a alors pour la maille L^{n+1} :

$$\begin{aligned} \alpha_L^{n+1}T_L^{n+1} - \alpha_L^nT_L^n &= \frac{dt}{2} [(DT)_{F,L}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1}] \\ &+ \frac{dt}{2} [(DT)_{F,L}^n - (DT)_{i_f^n-1/2}^n] \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

c) Pour la maille R^{n+1} ,

$$\begin{aligned} \alpha_R^{n+1}T_R^{n+1} - \alpha_R^nT_R^n &= \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1}] \\ &+ \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^n+1/2}^n - (DT)_{F,R}^n] \end{aligned} \quad (3.2.4)$$

d) Pour la maille $i_f^{n+1} + 1$,

$$\begin{aligned} dxT_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} - dxT_{i_f^n+1}^n &= \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1}] \\ &+ \frac{dt}{2} [(DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{i_f^n+1/2}^n] \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

CAS B : Le front change de maille à droite :

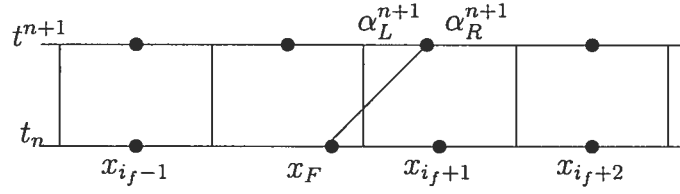


FIG. 3.2.2. CAS B : le front change de maille à droite.

Comme dans le problème d'advection, dans le cas où le front change de maille à droite, on utilise la formulation 2 pour mettre à jour la solution dans les mailles à gauche du front et la formulation combinée pour les mailles à droite du front. La formulation 2 demande uniquement le bilan conservatif pour la maille *équivalente*. Dans le CAS B on écrit donc les bilans conservatifs pour les mailles suivantes : Pour le côté gauche, la maille EL^{n+1} (*équivalente-gauche*) et pour le côté droit, les mailles R^{n+1} , $i_f^{n+1} + 1$. En utilisant le schéma de Crank-Nicolson on écrit :

a) Bilan pour la maille EL^{n+1} ,

$$(\alpha_L^{n+1} + dx)T_{E,L}^{n+1} - \alpha_L^n T_L^n = \frac{dt}{2} \left[(DT)_{F,L}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} \right] + \frac{dt}{2} \left[(DT)_{F,L}^n - (DT)_{i_f^n-1/2}^n \right]$$

d) Bilan pour la maille R^{n+1} ,

$$\alpha_R^{n+1} T_R^{n+1} - (T_{i_f^n+1}^n dx + \alpha_R^n T_R^n) = \frac{dt}{2} \left[(DT)_{F,R}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} \right] + \frac{dt}{2} \left[(DT)_{F,R}^n - (DT)_{i_f^n+3/2}^n \right]$$

e) Bilan pour la maille $i_f^{n+1} + 1$

$$dx T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} - dx T_{i_f^n+2}^n = \frac{dt}{2} \left[(DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} \right] + \frac{dt}{2} \left[(DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{i_f^n+5/2}^n \right]$$

3.2.2.2. Une approximation d'ordre deux pour le flux de chaleur

Pour les mailles régulières (ne contenant pas le front), l'approximation centrée de ces flux assure une précision d'ordre 2.

La technique utilisée pour les autres mailles est d'approcher les flux à proximité du front par des polynômes de degré 2 construits par interpolation polynômiale de trois points spécialement choisis.

On explique maintenant en détail la procédure de construction de ces polynômes. On utilise deux choix de points pour ces polynômes et on l'appelle formulation chacun de ces choix. Les indices 1 et 2 reflètent la formulation utilisée.

Formulation 1 :

a) Les polynômes P_L et P_R sont les polynômes d'interpolation par respectivement les points à gauche et à droite du front.

Pour la formulation 1 on a :

$$P_{L_1}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_L, T_L) \quad (x_{i_f-1}, T_{i_f-1})]$$

$$P_{R_1}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_R, T_R) \quad (x_{i_f+1}, T_{i_f+1})]$$

T_L et T_R désignent respectivement la température à gauche et à droite du front.

On effectue l'interpolation polynômiale :

$$P_{L_1}(x) = T(i_f - 1) \frac{(x - x_L)(x - x_F)}{(x_{i_f-1} - x_L)(x_{i_f-1} - x_F)} +$$

$$+ T_L \frac{(x - x_F)(x - x_{i_f-1})}{(x_L - x_F)(x_L - x_{i_f-1})} +$$

$$+ T_F \frac{(x - x_L)(x - x_{i_f-1})}{(x_F - x_L)(x_F - x_{i_f-1})}$$

et

$$P_{R_1}(x) = T(i_f + 1) \frac{(x - x_R)(x - x_F)}{(x_{i_f+1} - x_R)(x_{i_f+1} - x_F)} +$$

$$+ T_R \frac{(x - x_F)(x - x_{i_f+1})}{(x_R - x_F)(x_R - x_{i_f+1})} +$$

$$+ T_F \frac{(x - x_R)(x - x_{i_f+1})}{(x_F - x_R)(x_F - x_{i_f+1})}$$

b) En calculant : $P'_L(x_{i_f-1/2})$, $P'_L(x_F)$, $P'_R(x_{i_f-1/2})$ et $P'_R(x_F)$, on écrit les flux de chaleur de la façon suivante :

$$(DT)_{i_f-1/2,1} = -T(i_f - 1) \left[\frac{6\alpha_L}{(dx + \alpha_L)(dx + 2\alpha_L)} \right] - T_L \left[\frac{2(dx - 2\alpha_L)}{(dx + \alpha_L)\alpha_L} \right] \\ + T_F \left[\frac{2(dx - \alpha_L)}{(dx + 2\alpha_L)\alpha_L} \right]$$

$$(DT)_{i_f+1/2,1} = T(i_f + 1) \left[\frac{6\alpha_R}{(dx + \alpha_R)(dx + 2\alpha_R)} \right] + T_R \left[\frac{2(dx - 2\alpha_R)}{(dx + \alpha_R)\alpha_R} \right] \\ - T_F \left[\frac{2(dx - \alpha_R + dx)}{(dx + 2\alpha_R)\alpha_R} \right]$$

$$(DT)_{F,L,1} = T(i_f - 1) \left[\frac{2\alpha_L}{(dx + \alpha_L)(dx + 2\alpha_L)} \right] - T_L \left[\frac{2(2\alpha_L + dx)}{(dx + \alpha_L)\alpha_L} \right] \\ + T_F \left[\frac{2(3\alpha_L + dx)}{(dx + 2\alpha_L)\alpha_L} \right]$$

$$(DT)_{F,R,1} = -T(i_f + 1) \left[\frac{2\alpha_R}{(dx + \alpha_R)(dx + 2\alpha_R)} \right] + T_R \left[\frac{2(2\alpha_R + dx)}{(dx + \alpha_R)\alpha_R} \right] \\ - T_F \left[\frac{2(3\alpha_R + dx)}{(dx + 2\alpha_R)\alpha_R} \right]$$

Pour la suite on utilise les notations suivantes :

$$(DT)_{i_f-1/2,1} = k_1 T_{i_f-1} + j_1 T_L + g_1 T_F$$

$$(DT)_{i_f+1/2,1} = w_1 T_{i_f+1} + m_1 T_R + l_1 T_F$$

$$(DT)_{F,L,1} = a_1 T_{i_f-1} + b_1 T_L + c_1 T_F$$

$$(DT)_{F,R,1} = d_1 T_{i_f+1} + e_1 T_R + f_1 T_F$$

Formulation 2 :

On définit $T_{E,L}$ et $T_{E,R}$, appelées respectivement température *équivalente gauche* et température *équivalente droite*, de la façon suivante :

$$T_{E,L} = \frac{\alpha_L T_L + dx T_{i_f-1}}{dx + \alpha_L} \quad (3.2.6)$$

et

$$T_{E,R} = \frac{\alpha_R T_R + dx T_{i_f+1}}{dx + \alpha_R} \quad (3.2.7)$$

a) On définit les polynômes P_{L_2} et P_{R_2} :

$$P_{L_2}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_{E,L}, T_{E,L}) \quad (x_{i_f-2}, T_{i_f-2})]$$

$$P_{R_2}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_{E,R}, T_{E,R}) \quad (x_{i_f+2}, T_{i_f+2})]$$

b) On effectue l'interpolation polynômiale. On obtient les approximations suivantes :

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f-1/2,2} = & -T(i_f - 2) \left[\frac{2(3\alpha_L - dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] + T_{E,L} \left[\frac{2(2\alpha_L - 3dx)}{(dx + \alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] \\ & - T_F \left[\frac{2(\alpha_L - 4dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(dx + \alpha_L)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (DT)_{F,L,2} = & T(i_f - 2) \left[\frac{2(\alpha_L + dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] - T_{E,L} \left[\frac{2(2\alpha_L + 3dx)}{(dx + \alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(3\alpha_L + 4dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(dx + \alpha_L)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (DT)_{F,R,2} = & -T(i_f + 2) \left[\frac{2(\alpha_R + dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] + T_{E,R} \left[\frac{2(2\alpha_R + 3dx)}{(dx + \alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] \\ & - T_F \left[\frac{2(3\alpha_R + 4dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R)} \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f+1/2,2} = & T(i_f + 2) \left[\frac{2(3\alpha_R - dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] - T_{E,R} \left[\frac{2(2\alpha_R - 3dx)}{(dx + \alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(\alpha_R - 4dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R)} \right] \end{aligned}$$

Pour la suite on utilise les notations suivantes :

$$(DT)_{i_f-1/2,2} = k_2 T_{i_f-2} + j_2 T_{E_L} + g_2 T_F$$

$$(DT)_{i_f+1/2,2} = w_2 T_{i_f+2} + m_2 T_{E_R} + l_2 T_F$$

$$(DT)_{F,L,2} = a_2 T_{i_f-2} + b_2 T_{E_L} + c_2 T_F$$

$$(DT)_{F,R,2} = d_2 T_{i_f+2} + e_2 T_{E_R} + f_2 T_F$$

3.2.2.3. Discrétisation de l'équation de la température.

On se limite à écrire les équations de la température seulement pour le côté droit du front. Les équations pour le côté gauche s'écrivent de façon similaire, elles sont symétriques par rapport aux équations du côté droit.

Formulation 1 :

Pour la formulation 1, on déduit ces équations selon les bilans conservatifs décrits plus haut.

CAS A :

Équation pour T_R^{n+1} :

$$\begin{aligned} T_R^{n+1} = \frac{\alpha_R^n}{\alpha_R^{n+1}} T_R^n + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_1 \\ + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^n+1/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1 \end{aligned} \quad (3.2.8)$$

Équation pour $T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1}$:

$$\begin{aligned} T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} = T_{i_f^n+1}^n + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1})_1 \\ + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{i_f^n+1/2}^n)_1 \end{aligned} \quad (3.2.9)$$

CAS B :

Dans le cas où le front change de maille à droite, on n'écrit pas les équations

formulation 1 pour les mailles à gauche du front, car dans ce cas on utilise uniquement la formulation 2. Pour les mailles à droite du front on écrit :

Équation pour T_R^{n+1} :

$$T_R^{n+1} = \frac{\alpha_R^n T_R^n + dx T_{i_f^n+1}^n}{\alpha_R^{n+1}} + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_1 + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1 \quad (3.2.10)$$

Équation pour $T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1}$

$$T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} = T_{i_f^n+2}^n + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1})_1 + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f^n+5/2}^n - (DT)_{i_f^n+3/2}^n)_1 \quad (3.2.11)$$

Formulation 2 :

Pour la formulation 2 on utilise une autre stratégie.

On écrit le bilan conservatif pour la maille *équivalente-droite* d'où on déduit $T_{E,R}^{n+1}$.

On calcule

$$T_R^{n+1} = \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \int_0^{\alpha_R^{n+1}} P_R^{n+1}(x) \Delta x$$

où $P_R^{n+1}(x)$ est le polynôme construit par interpolation polynômiale des points :

(x_F, T_F) , $(x_{E,R}, T_{E,R})$, (x_{i_f+2}, T_{i_f+2}) .

CAS A :

a) Bilan conservatif pour la maille ER^{n+1} :

$$(\alpha_R^{n+1} + dx) T_{E,R}^{n+1} - (\alpha_R^n + dx) T_{E,R}^n = \frac{dt}{2} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_2 + \frac{dt}{2} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_2 \quad (3.2.12)$$

d'où on déduit $T_{E,R}^{n+1}$

$$T_{E,R}^{n+1} = \frac{(\alpha_R^n + dx)}{(\alpha_R^{n+1} + dx)} T_{E,R}^n + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_2 + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_2 \quad (3.2.13)$$

b') On construit le polynôme $P_R^{n+1}(x)$ par interpolation polynômiale des points :
 $(x_F, T_F), (x_{E,R}, T_{E,R}), (x_{i_f+2}, T_{i_f+2})$

b'') On calcule $T_R^{n+1} = \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \int_0^{\alpha_R^{n+1}} P_R^{n+1}(x) \Delta x$

$$\begin{aligned} P_R(x) = & T_{i_f+2} \frac{(x - x_{ER})(x - x_F)}{(x_{i_f+2} - x_{ER})(x_{i_f+2} - x_F)} + \\ & + T_{E,R} \frac{(x - x_F)(x - x_{i_f+2})}{(x_{ER} - x_F)(x_{ER} - x_{i_f+2})} + \\ & + T_F \frac{(x - x_{ER})(x - x_{i_f+2})}{(x_F - x_{ER})(x_F - x_{i_f+2})} \end{aligned}$$

On note :

$$\begin{aligned} k_1^R &= (x_F - x_{ER})(x_F - x_{i_f+2}) = \frac{1}{4}(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R) \\ k_2^R &= (x_{ER} - x_F)(x_{ER} - x_{i_f+2}) = -\frac{1}{4}(2dx + \alpha_R)(dx + \alpha_R) \\ k_3^R &= (x_{i_f+2} - x_{ER})(x_{i_f+2} - x_F) = \frac{1}{4}(2dx + \alpha_R)(3dx + 2\alpha_R) \end{aligned}$$

avec

$$x_F = 0, x_{i_f+2} = \frac{(3dx + 2\alpha_R)}{2} = b_1^R, x_{E,R} = \frac{(dx + \alpha_R)}{2} = b_2^R :$$

Alors :

$$\begin{aligned} P_R(x) = & \frac{T_{i_f+2}}{k_3^R} (x^2 - xx_{ER} - xx_F + x_F x_{ER}) + \\ & \frac{T_{E,R}}{k_2^R} (x^2 - xx_F - xx_{i_f+2} + x_F x_{i_f+2}) + \\ & \frac{T_F}{k_1^R} (x^2 - xx_{ER} - xx_{i_f+2} + x_{i_f+2} x_{ER}) \end{aligned}$$

On calcule :

$$\begin{aligned} a_1^R &= x_{i_f+2} x_{ER} = \frac{1}{4}(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R) \\ a_2^R &= 0; \\ a_3^R &= 0; \end{aligned}$$

En remplaçant et en intégrant on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^{\alpha_R^{n+1}} P_R^{n+1}(x) dx &= \frac{T_{i_f+2}^{n+1}}{k_3^R} \left(\frac{x^3}{3} - \frac{b_2^R x^2}{2} \right) \\ &\quad - \frac{T_{E,R}^{n+1}}{k_2^R} \left(\frac{x^3}{3} - \frac{b_1^R x^2}{2} \right) \\ &\quad - \frac{T_F^{n+1}}{k_1^R} \left(\frac{x^3}{3} - \frac{b_1^R x^2}{2} - \frac{b_2^R x^2}{2} + a_1^R x \right) \Big|_0^{\alpha_R^{n+1}} \end{aligned}$$

Et enfin,

$$\begin{aligned} T_R^{n+1} &= \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \int_0^{\alpha_R^{n+1}} P_R^{n+1}(x) dx = \frac{T_{i_f+2}^{n+1}}{k_3^R} \left(\frac{(\alpha_R^{n+1})^2}{3} - \frac{b_2^R \alpha_R^{n+1}}{2} \right) \\ &\quad - \frac{T_{E,R}^{n+1}}{k_2^R} \left(\frac{(\alpha_R^{n+1})^2}{3} - \frac{b_1^R \alpha_R^{n+1}}{2} \right) \\ &\quad - \frac{T_F^{n+1}}{k_1^R} \left(\frac{(\alpha_R^{n+1})^2}{3} - \frac{(b_1^R + b_2^R) \alpha_R^{n+1}}{2} + a_1^R \right) \end{aligned}$$

Pour la suite on utilise la notation suivante :

$$T_R^{n+1} = T_{i_f+2}^{n+1} K_3^R + T_{E,R}^{n+1} K_2^R + T_F^{n+1} K_1^R$$

c) L'équation pour $T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1}$ s'écrit à partir de l'expression (3.2.7)

$$T_{i_f+1}^{n+1} = \frac{(\alpha_R^{n+1} + dx) T_{E,R}^{n+1} - \alpha_R^{n+1} T_R^{n+1}}{dx}$$

De façon similaire on écrit les équations de la température pour le CAS B :

a) Bilan conservatif pour la maille ER^{n+1} :

$$\begin{aligned} (\alpha_R^{n+1} + dx) T_{E,R}^{n+1} - ((\alpha_R^n + dx) T_{E,R}^n + dx T_{i_f+2}^n) &= \frac{dt}{2} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_2 + \\ &\quad \frac{dt}{2} ((DT)_{i_f^n+5/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_2 \end{aligned}$$

d'où on déduit $T_{E,R}^{n+1}$

$$\begin{aligned} T_{E,R}^{n+1} &= \frac{(\alpha_R^n + dx)}{(\alpha_R^{n+1} + dx)} T_{E,R}^n + \frac{dx}{(\alpha_R^{n+1} + dx)} T_{i_f+2}^n \\ &\quad + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} ((DT)_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_2 + \\ &\quad + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} ((DT)_{i_f^n+5/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_2 \end{aligned}$$

b-c) Le calcul de T_R^{n+1} et de $T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1}$ est le même que dans le CAS A.

Formulation combinée

Pour des raisons qu'on va expliquer plus loin, on n'utilise pas la formulation 1 ni la formulation 2 comme algorithme de résolution pour le problème de Stefan.

On met en oeuvre une formulation combinée obtenue comme une moyenne entre la formulation 1 et la formulation 2 avec la pondération suivante :

Pour le côté gauche du front :

$$\left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)^2 (Formulation\ 1) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)^2\right] (Formulation\ 2)$$

Pour le côté droit du front :

$$\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2 (Formulation\ 1) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2\right] (Formulation\ 2)$$

On remarque que la pondération est différente de celle utilisée dans le chapitre 2 (problème d'advection). Ici, on multiplie la formulation 1 avec $\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2$. On rappelle que dans le chapitre 2 on utilise $\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)$. Ici on veut simplifier les deux facteur de α_R^{n+1} (α_L^{n+1} pour les équations de côté gauche du front) qui apparaissent dans l'expression pour la température et dans l'expressions du flux. Par exemple, on reprend ici ces deux expressions pour la maille R^{n+1} de la formulation 1.

$$\begin{aligned} T_R^{n+1} &= \frac{\alpha_R^n}{\alpha_R^{n+1}} T_R^n + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_1 \\ &\quad + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f^n+1/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1 \end{aligned}$$

avec par exemple

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f^{n+1}+1/2,1}^{n+1} &= T_R^{n+1} \left[\frac{2(dx - 2\alpha_R^{n+1})}{\alpha_R^{n+1}(dx + \alpha_R^{n+1})} \right] - T_F^{n+1} \left[\frac{2(dx - \alpha_R^{n+1} + dx)}{\alpha_R^{n+1}(dx + 2\alpha_R^{n+1})} \right] \\ &\quad + T_{i_f+1}^{n+1} \left[\frac{6\alpha_R^{n+1}}{(dx + \alpha_R^{n+1})(dx + 2\alpha_R^{n+1})} \right] \end{aligned}$$

La division par α_R^{n+1} de ces deux expressions rend la formulation 1 problématique si α_R^{n+1} est très petit ou zéro. On utilise donc la pondération ci-dessus pour corriger ce défaut de la formulation 1.

Finalement, on écrit les équations de mise à jour de la température pour chaque maille proche du front.

Cas A :

Équation pour la maille R^{n+1} :

$$\begin{aligned}
 & \left[-\frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (l_1 - f_1) - \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) K_1^R \right] T_F^{n+1} + \\
 & \left[1 - \frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (m_1 - e_1) \right] T_R^{n+1} + \\
 & \left[\left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) K_2^R \right] T_{E,R}^{n+1} - \left[\frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (w_1 - d_1) \right] T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} + \\
 & \left[\left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) K_3^R \right] T_{i_f^{n+1}+2}^{n+1} = b_R^A
 \end{aligned} \tag{3.2.14}$$

avec :

$$b_R^A = \frac{\alpha_R^{n+1} \alpha_R^n}{dx^2} T_R^n + \frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} ((DT)_{i_f^{n+1}/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1$$

Équation pour la maille ER^{n+1} :

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 f_1 + \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) f_2 \right) \right] T_F^{n+1} + \\
 & \left[\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 e_1 \right] T_R^{n+1} + \\
 & \left[1 + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) e_2 \right] T_{E,R}^{n+1} + \\
 & \left[\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(\frac{1}{dx} + \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 d_1 \right) \right] T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} + \\
 & \left[\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(-\frac{1}{dx} + \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) d_2 \right) \right] T_{i_f^{n+1}+2}^{n+1} = b_{E,R}^A
 \end{aligned} \tag{3.2.15}$$

avec :

$$b_{E,R}^A = \frac{(\alpha_R^n + dx)}{(\alpha_R^{n+1} + dx)} T_{E,R}^n + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} (DT)_{i_f^n+3/2}^n -$$

$$\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 (DT)_{F,R,1}^n + \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) (DT)_{F,R,2}^n \right)$$

Équation pour la maille $i_f^{n+1} + 1$:

$$\left[\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \frac{dt}{2dx} l_1 \right] T_F^{n+1} + \left[\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \frac{dt}{2dx} m_1 + \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right] T_R^{n+1} -$$

$$\left[\left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \right) \frac{dx + \alpha_R^{n+1}}{dx} \right] T_{E,R}^{n+1} + \left[1 + \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \frac{dt}{2dx} \left(\frac{1}{dx} - w_1 \right) \right] T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} -$$

$$\left[\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \frac{dt}{2dx^2} \right] T_{i_f^{n+1}+2}^{n+1} = b_{i_f^{n+1}+1}^A$$

(3.2.16)

avec

$$b_{i_f^{n+1}+1}^A = \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right)^2 \left(T_{i_f^n+1}^n + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{i_f^n+1/2}^n)_1 \right)$$

Cas B :

L'écriture de la partie gauche de ces équations est identique à celle des équations relatives au CAS A. Par contre les parties droites de ces équations changent.

b_R^A , $b_{E,R}^A$, et $b_{i_f^{n+1}+1}^A$ changent pour les b_R^B , $b_{E,R}^B$, et $b_{i_f^{n+1}+1}^B$ comme suit :

$$b_R^B = \frac{\alpha_R^{n+1} \alpha_R^n}{dx^2} T_R^n + \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} T_{i_f^n+1}^n + \frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} ((DT)_{i_f^n+3/2}^n - (DT)_{F,R,1}^n)$$

$$b_{E,R}^B = \frac{\alpha_R^n + dx}{\alpha_R^{n+1} + dx} T_{E,R}^n + \frac{dx}{\alpha_R^{n+1} + dx} T_{i_f^n+2}^n + \frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} (DT)_{i_f^n+5/2}^n -$$

$$\frac{dt}{2(\alpha_R^{n+1} + dx)} \left(\left[\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right]^2 (DT)_{F,R,1}^n + \left(1 - \left[\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right]^2 \right) (DT)_{F,R,2}^n \right)$$

$$b_{i_f^{n+1}+1}^B = \left[\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right]^2 \left(T_{i_f+2}^n + \frac{dt}{2dx} ((DT)_{i_f+5/2}^n - (DT)_{i_f+3/2}^n)_1 \right)$$

On récupère ainsi un système d'équations pour la température T . Ce système est composé de $(N + 3)$ équations de la température pour $N + 3$ inconnues

$$T_1^{n+1} \dots T_{i_f-1}^{n+1}, T_{E,L}^{n+1}, T_L^{n+1}, T_R^{n+1}, T_{E,R}^{n+1}, T_{i_f+1}^{n+1} \dots T_N^{n+1}.$$

La température au front est connue.

3.2.3. Système discret du problème de Stefan.

On rappelle que le problème de Stefan consiste à trouver la température et l'interface entre différentes phases d'un matériel. Ce problème se modélise par le système suivant :

$$\begin{cases} C_1 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(k_1 \frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_1 \\ C_2 \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(k_2 \frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_2 \end{cases} \quad (3.2.17)$$

Au front la vitesse V satisfait :

$$LV = - \left[k_1 \frac{dT_{liq}}{dx} - k_2 \frac{dT_{sol}}{dx} \right] \quad (3.2.18)$$

L est la chaleur latente de solidification, $C_{1,2}$ est la capacité volumique de la chaleur, $k_{1,2}$ est le coefficient de diffusion thermique.

La température au front est $T_F = T_m$. La position du front est donnée par

$$\frac{dx_F}{dt} = V \quad (3.2.19)$$

Les formules (3.2.17) constituent le système des équations pour la température T , et (3.2.18)-(3.2.19) constituent le système des équations pour la géométrie.

Ces deux systèmes sont couplés. La température dépend de la géométrie et la

géométrie dépend de la température.

Par conséquent, le système (3.2.17)-(3.2.18)-(3.2.19) est fortement non linéaire à cause de la dépendance non triviale de la température par rapport à la frontière interne.

Cette propriété est vraiment évidente dans la version discrète du système (3.2.17)-(3.2.18)-(3.2.19) présentée maintenant.

Le système discret (Ξ) se compose de :

1. (Ξ_T) - Les équations de la température obtenues via la formulation combinée : (3.2.14)-(3.2.15)-(3.2.16)...etc.

2. (Ξ_G) - Les équations relatives à la géométrie :

$$V^{n+1} = -[(DT)_{F,L}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1}]$$

$$\alpha_L^{n+1} = \alpha_L^n + \frac{1}{2}(V^{n+1} + V^n)dt \quad \text{et} \quad \alpha_R^{n+1} = dx - \alpha_L^{n+1}$$

$$x_F^{n+1} = x_F^n + \frac{1}{2}(V^{n+1} + V^n)dt.$$

On réécrit par exemple l'une des équations pour la température.

Équation pour la maille T_R^{n+1} :

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (l_1 - f_1) - \left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2\right) K_1^R \right] T_F^{n+1} + \\ & \left[1 - \frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (m_1 - e_1) \right] T_R^{n+1} + \\ & \left[\left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2\right) K_2^R \right] T_{E,R}^{n+1} - \left[\frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} (w_1 - d_1) \right] T_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} + \\ & \left[\left(1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2\right) K_3^R \right] T_{i_f^{n+1}+2}^{n+1} = b_R^A \end{aligned}$$

avec :

$$b_R^A = \frac{\alpha_R^{n+1} \alpha_R^n}{dx^2} T_R^n + \frac{dt}{2dx^2} \alpha_R^{n+1} ((DT)_{i_f^{n+1}+2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1$$

Le système discret (Ξ) est donc clairement non linéaire. Toutes les équations

pour la température dépendent de la géométrie (des parties α_L , α_R et donc de la position du front x_F) et la géométrie dépend de la vitesse V , qui est donnée par :

$$V^{n+1} = -[(DT)_{F,L}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1}]$$

où $(DT)_{F,*}^{n+1}$ est le flux numérique au front F . Ceci indique que V dépend de la température, par conséquent la géométrie dépend de la température.

Ce couplage non trivial entre la température T et la géométrie rend le système non linéaire (Ξ) difficile à résoudre. Dans la section suivante on explique comment on parvient à la résolution du système non linéaire (Ξ).

3.2.4. Algorithme itératif.

On propose ici une manière de résoudre le système non linéaire (Ξ) en le fractionnant en deux parties linéaires, tel que décrit ci dessous. En effet, on remarque que :

- Si la vitesse V , la position du front x_F , les parties α_L , α_R sont données alors le système des équations de la température (Ξ_T) devient un système linéaire pour T .
- Si la température T est donnée, on peut facilement résoudre les équations du système en ce qui concerne la géométrie (Ξ_G) pour V , α_L , α_R et donc pour x_F .

Ces remarques nous ont conduits à considérer un algorithme itératif de résolution du système non linéaire (Ξ). Cet algorithme est présenté dans le diagramme suivant :

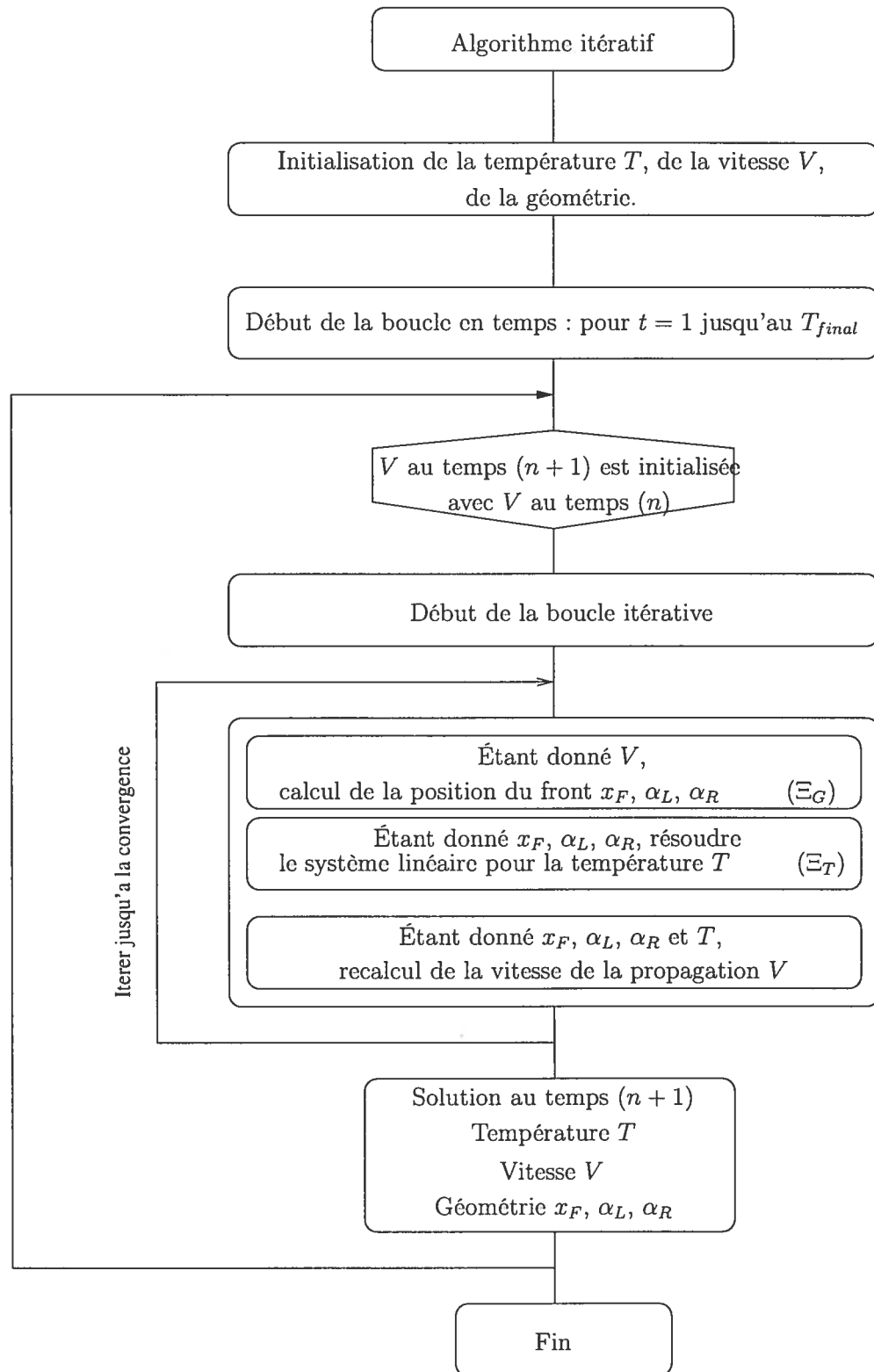


FIG. 3.2.3. Algorithme itératif

3.2.5. Résultats numériques et conclusions.

Cas test.

On considère le cas test suivant : $C_1 = 1, C_2 = 1, k_1 = 1, k_2 = 1$ et $L = 1$.

Les équations (3.1.1) s'écrivent,

$$\begin{cases} \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_1 \\ \frac{dT}{dt} = \frac{d}{dx} \left(\frac{dT}{dx} \right) & \text{si } x \in \Omega_2 \end{cases} \quad (3.2.20)$$

La condition initiale est donnée par :

$$T_0(x) = \begin{cases} -1 + e^{-x} & \text{si } x > x_F(0) \\ 0 & \text{si } x \leq x_F(0) \end{cases} \quad (3.2.21)$$

Les conditions aux bords sont :

$$\begin{aligned} T(0, t) &= 0 \\ T(1, t) &= -1 + e^{-V(-x_F(t))} \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

avec $V=1$ et $x_F(t) = x_F(0) + Vt$.

La solution exacte est donnée par :

$$T(x, t) = \begin{cases} -1 + e^{-V(x-x_F(t))} & \text{si } x > x_F(t) \\ 0 & \text{si } x < x_F(t) \end{cases} \quad (3.2.23)$$

avec $x_F(t) = x_F(0) + Vt$, et $V = 1$.

La solution est donc translatée vers la droite avec la vitesse $V = 1$.

Comparaisons entre les trois formulations.

On résout le problème numériquement à l'aide des trois formulations : formulation 1, formulation 2, formulation combinée (formulation 3).

Voici les conclusions principales basées sur les expériences numériques.

a) Comparativement aux deux autres formulations, la formulation 1 est la plus précise mais la moins robuste (voir Tableau (3.2.1)).

Dans ce tableau, n est le compteur des pas de temps effectué, $\frac{\alpha_L}{dx}$ est la fraction

n	$\frac{\alpha_L}{dx}$	Formulation 1	Formulation 2	Formulation 3
2	0.2000	1.0000	0.9993	0.9999
3	0.4000	1.0000	0.9996	1.0001
4	0.6000	1.0000	1.0002	0.9999
5	0.8000	1.0000	1.0000	1.0001
6	0.0000	1.0000	1.0001	1.0000
7	0.2000	1.0000	0.9994	0.9999
8	0.4000	1.0000	0.9996	1.0001
9	0.6000	1.0000	1.0000	1.0000
10	0.8000	1.0000	1.0002	1.0001
11	1.0000	Matrix singular or badly scaled	0.9995	1.0000

TAB. 3.2.1. Comparaison de la vitesse numérique V entre les formulations 1, 2 et 3 (vitesse exacte $V_{ex} = 1$), $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$

qui nous indique la position du front par rapport à l'interface du maillage. Pour $n = 6$, $\frac{\alpha_L}{dx} = 0.0000$, ce qui veut dire que la fraction α_L est quasiment nulle, le front vient de traverser une maille.

Pour $n = 11$, $\frac{\alpha_L}{dx} = 1.0000$. Dans ce cas α_L est très proche de dx . Le front est sur le point de changer de maille. Pour la formulation 1, les valeurs numériques de la vitesse sont presque égale à sa valeur exacte 1, à l'exception de $n = 11$.

Cependant cette formulation n'est pas robuste. Quand la partie droite α_R^{n+1} devient très petite, cette formulation ne permet pas de calculer la solution. Premièrement elle ne permet pas de calculer précisément les flux $\frac{dT}{dx}$ car les coefficients $a_1, b_1, \dots, m_1, l_1 \dots$ etc sont divisés par le facteur α_R^{n+1} . Par exemple

$$(DT)_{i_f+1/2,1}^{n+1} = w_1 T_{i_f+1}^{n+1} + m_1 T_R^{n+1} + l_1 T_F^{n+1}$$

avec

$$w_1 = \frac{6\alpha_R^{n+1}}{(dx + \alpha_R^{n+1})(dx + 2\alpha_R^{n+1})}$$

$$m_1 = \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \frac{2(dx - 2\alpha_R^{n+1})}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

$$l_1 = \frac{1}{\alpha_R^{n+1}} \frac{2(dx - \alpha_R^{n+1})}{(dx + 2\alpha_R^{n+1})}$$

En plus,

$$\begin{aligned} T_R^{n+1} = & \frac{\alpha_R^n}{\alpha_R^{n+1}} T_R^n + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f+1/2}^{n+1} - (DT)_{F,R}^{n+1})_1 \\ & + \frac{dt}{2\alpha_R^{n+1}} ((DT)_{i_f+1/2}^n - (DT)_{F,R}^n)_1 \end{aligned}$$

Numériquement ceci se manifeste avec une matrice très mal conditionnée.

$$(COND(A) = 4.413802e - 020)$$

ou bien avec l'affiche d'un message de MATLAB, "Matrice singulière".

La solution manque de précision ou bien le code ne retourne pas de solution.

On abandonne l'idée de résoudre le problème de Stefan avec uniquement la formulation 1. La solution du problème (3.2.17)-(3.2.18)-(3.2.19) est obtenue donc de la formulation 2 et de la formulation 3.

Voici les représentations graphiques. On affiche sur une même fenêtre la solution exacte et la solution approchée.

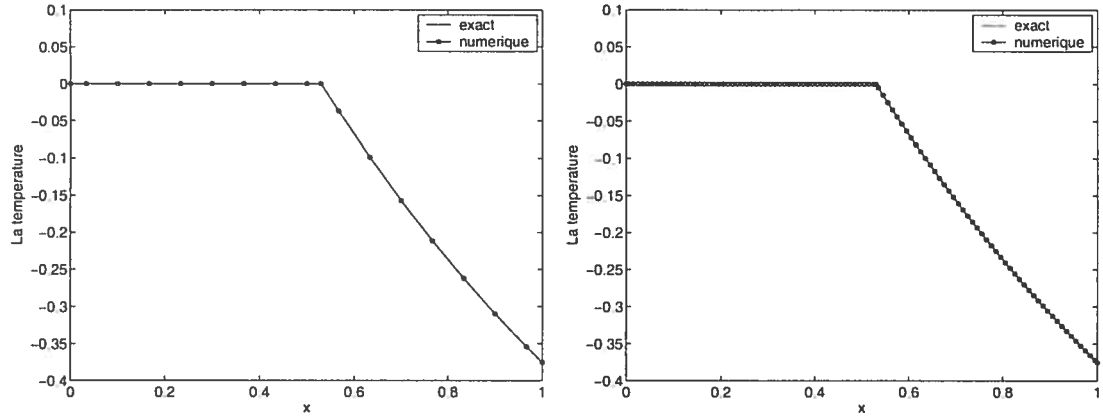


FIG. 3.2.4. Température, solution formulation 2, figure à gauche $N = 15$, figure à droite $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$

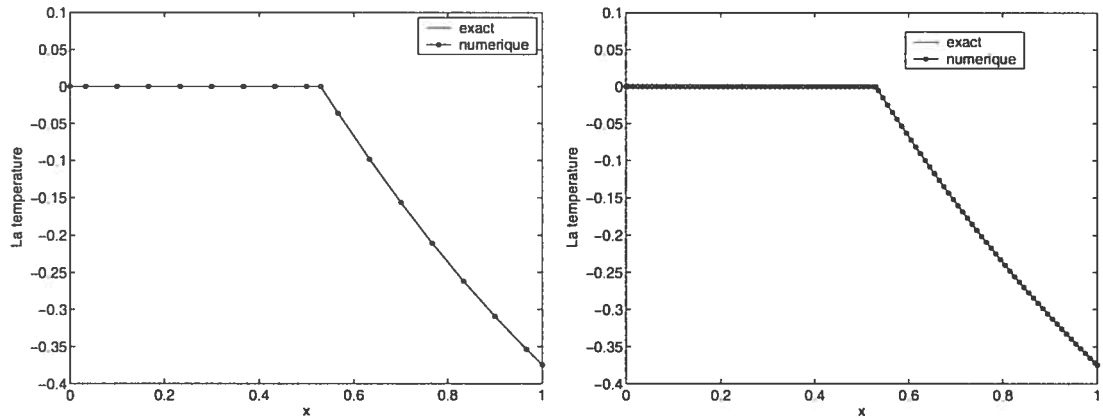


FIG. 3.2.5. Température, solution formulation combinée, figure à gauche $N = 15$, figure à droite $N = 100$, $dx = 1/N$, $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$

b) La formulation 2 est la moins précise entre les trois formulations, mais elle est robuste.

Quand le front change de maille, cette formulation améliore nettement le calcul des flux $\frac{dT}{dx}$. Elle ne tient pas compte des parties nulles α_L^{n+1} ou α_R^{n+1} .

Par contre cette formulation a l'inconvénient que le passage du front dans la nouvelle maille ne se fait pas de façon continue. Il y a un SAUT. Ce saut se produit dans le cas où le front se prépare à changer de maille. Dans ce cas α_R est vraiment petite. Au cours des itérations dans un pas de temps le front semble à avoir la

difficulté à passer dans la maille voisine. Au cours de ce phénomène il se produit ce saut de la vitesse de la propagation du front. Pour le mesurer on raffine énormément le maillage au voisinage du front et on mesure la différence de la vitesse à gauche et à droite du front. Considerons le choix des points impliqués dans cette formulation. Pour les deux cas A et B, les points utilisés pour les bilans conservatifs de cette formulation sont

$$F^{n+1}, \quad ER^{n+1}, \quad i_f^{n+1} + 2$$

(la vitesse est positive et regardons par exemple les points à droite du front).

Dans la figure (3.2.6) on remarque que le passage du front à la maille suivante ne se fait pas de façon continue. On remarque tout de suite qu'il y a un décalage en espace. Ce saut dépend de choix de dx et dt (puisque dt dépend elle même de dx -

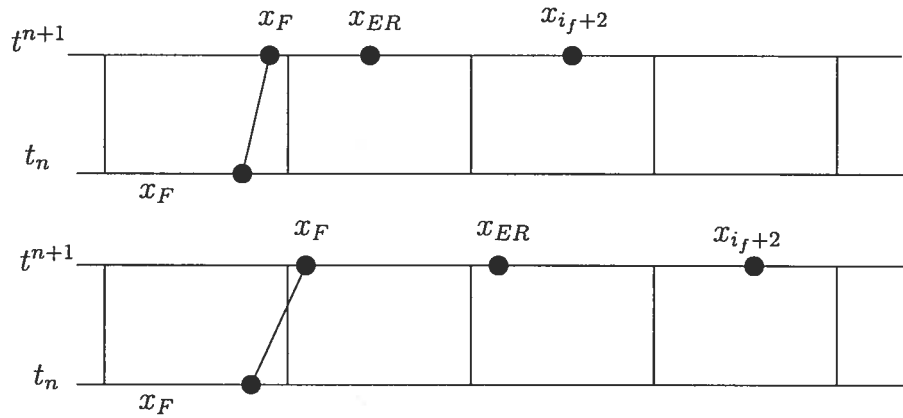


FIG. 3.2.6. Choix des points pour la formulation 2

on ne veut pas que le front traverse plus qu'une maille à la fois.) Le saut diminue

dx	Saut
1/100	1.8472e-003
1/200	8.7255e-004
1/400	4.0513e-004
1/800	1.8961e-004

TAB. 3.2.2. Dépendance du saut de la vitesse en fonction de dx

de la même façon que dx , ce qui fait que la formulation 2 est de précision d'ordre

un.

c) La formulation 3 (formulation combinée) est une moyenne entre les deux formulations précédentes. Elle a les propriétés suivante :

i) La précision de cette formulation est entre les précisions des formulations 1 et 2. Elle est moins précise que la formulation 1 et plus précise que la formulation 2. (voir tableau (3.2.1)).

ii) Elle est robuste quand le front change de maille.

Si par exemple α_R^{n+1} est grande, la pondération donne plus de poids à la formulation 1 qui est très précise dans un tel cas. Si α_R^{n+1} est petite ou même zéro, la pondération utilise plus la formulation 2 et le facteur α_R^{n+1} dans la formulation 1 disparaît lors de la multiplication avec la pondération $\left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)^2$.

iii) Le passage du front à la maille suivante se fait de façon continue. Il n'y a plus de SAUT!

Le choix des points qui entrent en jeu pour construire l'algorithme, pour les mailles proche du front, nous explique que le passage du front à la maille suivante se fait de façon continue. (voir Figure 3.2.7)

Ici, quand le front au temps t^{n+1} se trouve dans la même maille qu'au temps t^n

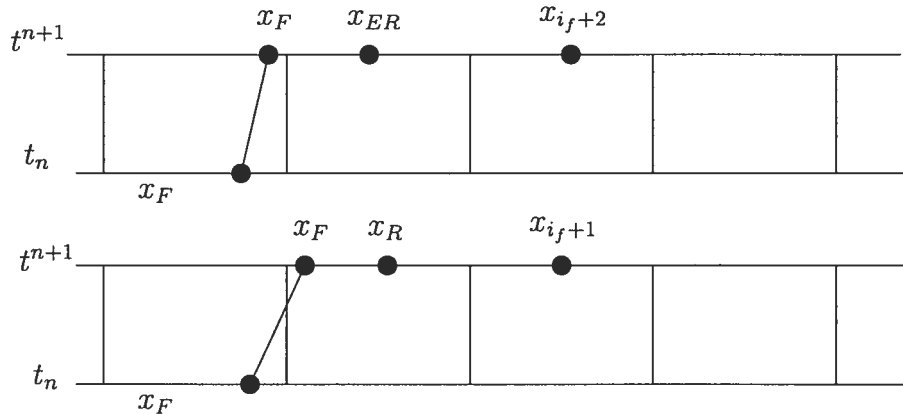


FIG. 3.2.7. Choix des points pour la formulation combinée

et la partie α_R^{n+1} est proche de zéro, les points utilisés pour les bilans conservatifs sont

$$F^{n+1}, \quad ER^{n+1}, \quad i_f^{n+1} + 2$$

(la vitesse est positive et regardons par exemple les points à droite du front). Quand le front vient de changer de maille, i.e α_L^{n+1} est proche de zéro, les points utilisés pour les bilans conservatifs sont

$$F^{n+1}, \quad R^{n+1}, \quad i_f^{n+1} + 1$$

Dans la figure (3.2.7) on remarque que le passage du front à la maille suivante se fait donc de façon continue.

iv) La formulation 3 est d'ordre 2.

Le tableau suivante donne la norme L_1 de l'erreur pour des choix différents de dx .

dx	Norme L_1 de l'erreur	dx	Norme L_1 de l'erreur
1/40	1.5327e-005	1/40	2.3893e-006
1/80	4.2040e-006	1/80	4.7643e-007
1/160	1.1794e-006	1/160	8.0292e-008
1/320	2.7602e-007	1/320	1.0529e-008
1/640	5.7229e-008	1/640	1.4845e-009

TAB. 3.2.3. Norme L_1 de l'erreur pour des choix différents de dx ,
tableau à gauche : formulation 2, tableau à droite : formulation 3,
 $dt = dx/4$, $T_{final} = 0.2$.

Comparativement à la formulation 2, dans la formulation 3 on gagne presque un facteur 10 de précision. Dans le tableau à droite, on remarque que si dx diminue d'un facteur de 2 alors la norme L_1 de l'erreur diminue d'au moins un facteur de 4. Le schéma de discrétisation de la formulation 3 est donc d'ordre de précision

2.

On peut confirmer l'ordre de précision en calculant la pente de la variation de l'erreur en fonction de dx .

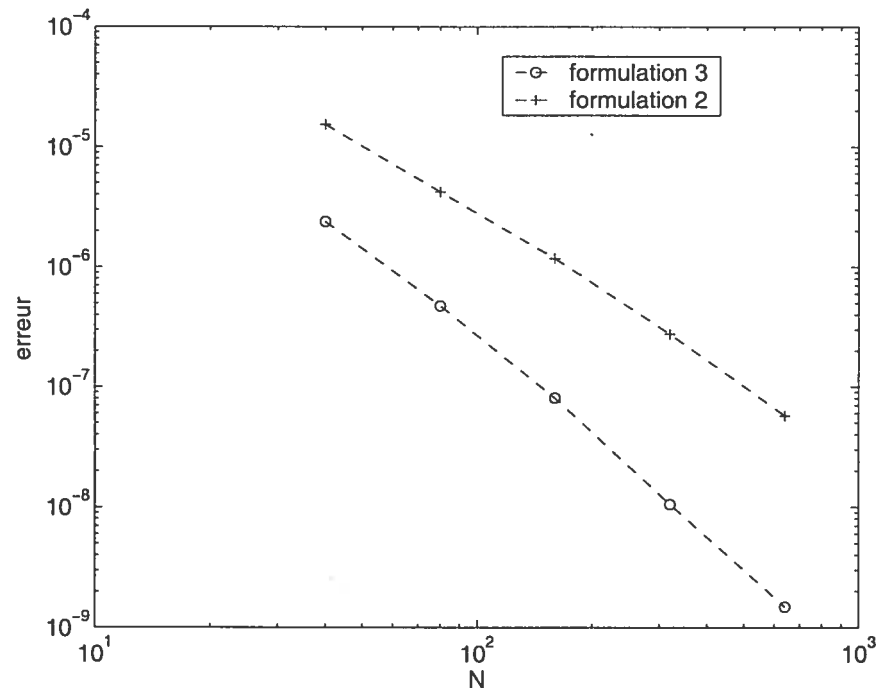


FIG. 3.2.8. Erreur en fonction de x

Pour la formulation 3, la pente de la variation de l'erreur en fonction de dx est 2.6805 ce qui confirme l'ordre de précision de cette formulation.

Dans la suite on va appliquer la méthode de suivi de front implicite, eulérienne, au système diphasique à faible nombre de Mach.

Chapitre 4

MÉTHODE DE SUIVI DE FRONT IMPLICITE EULÉRIENNE POUR LE SYSTÈME DIPHASIQUE BAS MACH

Dans ce chapitre, on applique la méthode de suivi de front implicite, eulérienne, au problème du système diphasique à faible nombre de Mach. On combine ici tous les éléments testés dans les deux problèmes précédents. On considère le système diphasique bas Mach pour deux gaz parfaits sous sa forme conservative, tel que présenté dans le chapitre 1.

4.1. DÉVELOPPEMENT DE LA MÉTHODE DE RÉOLUTION DU SYSTÈME DIPHASIQUE BAS MACH EN UNE DIMENSION

La configuration unidimensionnelle du problème à résoudre est illustrée dans la figure suivante :

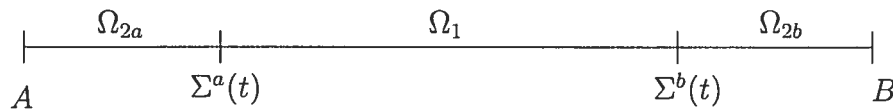


FIG. 4.1.1. Domaine Ω unidimensionnel

Il s'agit donc d'une bulle dans la phase 1 qui occupe Ω_1 entourée à gauche et à droite par la phase 2, respectivement dans Ω_{2a} , Ω_{2b} . Le problème est constitué

des équations pour le système diphasique bas Mach

$$\begin{cases} \partial_t Y_1 + u \partial_x Y_1 = 0 \\ \partial_t \rho + \partial_x (\rho u) = 0 \end{cases} \quad (4.1.1)$$

et

$$\begin{cases} \partial_x u = G(t, x) \\ \rho(\partial_t u + u \partial_x u) = -\partial_x \Pi(t, x) \end{cases} \quad (4.1.2)$$

où

$$G(t, x) \equiv -\frac{P'(t)}{\gamma(Y_1)P(t)} + \frac{\gamma(Y_1) - 1}{\gamma(Y_1)P(t)} \partial_x [\lambda(Y_1) \partial_x T], \quad (4.1.3)$$

la pression $P(t)$ étant la solution de l'équation différentielle ordinaire

$$P'(t) = \beta_2^1 \frac{[\lambda(Y_1) \partial_x T]_{\Sigma^b(t)} - [\lambda(Y_1) \partial_x T]_{\Sigma^a(t)}}{\int_A^B \frac{dx}{\gamma(Y_1)}} \quad (4.1.4)$$

avec

$$\beta_2^1 = [\beta]_{\Sigma} \equiv \beta_1 - \beta_2 = \frac{\gamma_1 - 1}{\gamma_1} - \frac{\gamma_2 - 1}{\gamma_2}.$$

Les fonctions positives $\lambda(Y_1)$, $C_p(Y_1)$, $\gamma(Y_1)$ et $R(Y_1)$ sont données par

$$\begin{cases} \lambda(Y_1) = Y_1 \lambda_1 + (1 - Y_1) \lambda_2, \\ C_p(Y_1) = Y_1 \frac{\gamma_1 R_1}{\gamma_1 - 1} + (1 - Y_1) \frac{\gamma_2 R_2}{\gamma_2 - 1}, \\ \gamma(Y_1) = Y_1 \gamma_1 + (1 - Y_1) \gamma_2, \\ R(Y_1) = Y_1 R_1 + (1 - Y_1) R_2. \end{cases} \quad (4.1.5)$$

Les conditions aux limites sont définies avec

$$\left\{ \begin{array}{l} T|_{\Sigma_1^a} = T|_{\Sigma_2^a}, \\ \lambda_1 \partial_x T|_{\Sigma_1^a} = \lambda_2 \partial_x T|_{\Sigma_2^a} \equiv \lambda \partial_x T|_{\Sigma^a}, \\ \\ T|_{\Sigma_1^b} = T|_{\Sigma_2^b}, \\ \lambda_1 \partial_x T|_{\Sigma_1^b} = \lambda_2 \partial_x T|_{\Sigma_2^b} \equiv \lambda \partial_x T|_{\Sigma^b}, \\ \\ \partial_x T|_{x=A,B} = 0, \\ \\ u|_{x=A,B} = 0. \end{array} \right. \quad (4.1.6)$$

Les lois d'état des deux gaz parfaits sont des constantes données. Nous utiliserons les valeurs suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_1 = 1, 2, \\ \\ R_1 = 0, 2 \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \gamma_2 = 3, \\ \\ R_2 = 0, 7. \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \lambda_1 = 1, \\ \\ \lambda_2 = 2 \end{array} \right.$$

On rappelle que les conditions (4.1.6) sont les conditions de la continuité de la température, du flux de chaleur et de la vitesse dans Ω .

Note : Dans cette configuration, il est possible de prédire entièrement et de façon unique la topologie finale Ω_1^∞ et Ω_2^∞ à l'état d'équilibre. Cet état d'équilibre est caractérisé par la température T^∞ et la pression thermodynamique P^∞ , $\rho_{\Sigma_a}^\infty$ et $\rho_{\Sigma_b}^\infty$. (Voir la propriété 5, §2.2.3 dans [1]).

4.1.1. Schéma de discrétisation du système diphasique bas Mach

On utilise le maillage spatio - temporel défini dans le chapitre 2 :

$x_i = (i - 1/2)dx$, $1 \leq i \leq N$ et $t^n = n dt$ pour $n \geq 0$.

Tout d'abord, on présente le schéma de discrétisation du système (4.1.1), (4.1.2), (4.1.3) :

$$\begin{aligned}\rho_i^{n+1} &= \rho_i^n + \frac{dt}{2dx} [Flux_{i-1/2}^{n+1} - Flux_{i+1/2}^{n+1}] + \frac{dt}{2dx} [Flux_{i-1/2}^n - Flux_{i+1/2}^n] \\ P^{n+1} &= \wp(P^n, T^n, T^{n+1}, \Sigma^n, \Sigma^{n+1}) \\ u_{i+1/2}^{n+1} &= u_{i-1/2}^{n+1} + dx G_i^{n+1}\end{aligned}\tag{4.1.7}$$

avec

$$G_i^{n+1} = -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_i^{n+1}.\tag{4.1.8}$$

Les flux discrets $Flux_{i-1/2}^{n+1}$ seront définis dans la section 4.1.2.

Afin de conserver l'énergie, la pression P^{n+1} est obtenue à partir du schéma conservatif en énergie :

$$P^{n+1} = P^n \cdot \frac{\int_i \frac{dx}{\gamma_i^n - 1}}{\int_i \frac{dx}{\gamma_i^{n+1} - 1}}.\tag{4.1.9}$$

La discrétisation des intégrales spatiales dans cette formule sera décrite dans la section (4.1.3).

Connaissant P^{n+1} , le champ de température T^{n+1} est alors calculé selon

$$T_i^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{R_i^{n+1} \rho_i^{n+1}}.\tag{4.1.10}$$

Ce faisant, on obtient un schéma globalement conservatif en masse et en énergie. Tenant compte du schéma (4.1.7)-(4.1.10), on développe maintenant l'algorithme complet de résolution pour les mailles régulières et pour les mailles à proximité du front.

4.1.2. Algorithme de suivi de front pour l'équation de la conservation de la masse totale

Comme dans le chapitre 2 (problème d'advection), on divise la discrétisation de cette équation en deux parties :

1. discrétisation spatiale et temporelle pour les *mailles régulières*,
2. discrétisation spatiale et temporelle pour les mailles à proximité du front.

On utilise le schéma de Crank-Nicolson pour la discrétisation temporelle et le schéma amont pour la discrétisation en espace.

Pour les *mailles régulières* on écrit :

$$\rho_i^{n+1} = \rho_i^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i-1/2}^{n+1} - F_{i+1/2}^{n+1}] + \frac{dt}{2dx} [F_{i-1/2}^n - F_{i+1/2}^n] \quad (4.1.11)$$

4.1.2.1. Flux de masse pour le schéma amont (ordre 1) - mailles régulières

Tenant compte des conditions aux limites, on définit :

$F^{n+1}(1) = 0$ et $F^{n+1}(N+1) = 0$ et pour toute *maille régulière* i :

$$\left\{ \begin{array}{ll} F_{i-1/2} = u_{i-1/2} \rho_{i-1} & \text{si } u_{i-1/2} \geq 0 \\ & = u_{i-1/2} \rho_i & \text{si } u_{i-1/2} < 0 \\ F_{i+1/2} = u_{i+1/2} \rho_i & \text{si } u_{i+1/2} \geq 0 \\ & = u_{i+1/2} \rho_{i+1} & \text{si } u_{i+1/2} < 0 \end{array} \right. \quad (4.1.12)$$

4.1.2.2. Flux de masse pour le schéma amont TVD (ordre 2) - mailles régulières

$F^{n+1}(1) = 0$ et $F^{n+1}(N+1) = 0$ et pour toute *maille régulière* i :

$$\left\{ \begin{array}{ll} F_{i-1/2} = u_{i-1/2} \left(\rho_{i-1} + \frac{dx}{2} \sigma_{i-1/2}^p \right) & \text{si } u_{i-1/2} \geq 0 \\ & = u_{i-1/2} \left(\rho_i - \frac{dx}{2} \sigma_{i-1/2}^n \right) & \text{si } u_{i-1/2} < 0 \\ F_{i+1/2} = u_{i+1/2} \left(\rho_i + \frac{dx}{2} \sigma_{i+1/2}^p \right) & \text{si } u_{i+1/2} \geq 0 \\ & = u_{i+1/2} \left(\rho_{i+1} - \frac{dx}{2} \sigma_{i+1/2}^n \right) & \text{si } u_{i+1/2} < 0 \end{array} \right. \quad (4.1.13)$$

avec

$$\begin{aligned} \sigma_{i-1/2}^p &= \minmod \left(\frac{\rho_{i-1} - \rho_{i-2}}{dx}, \frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{dx} \right) \\ \sigma_{i-1/2}^n &= \minmod \left(\frac{\rho_i - \rho_{i-1}}{dx}, \frac{\rho_{i+1} - \rho_i}{dx} \right) \end{aligned} \quad (4.1.14)$$

où la fonction \minmod de deux arguments est définie par

$$\minmod(a, b) = \begin{cases} a & \text{if } |a| < |b| \text{ et } ab > 0 \\ b & \text{if } |b| < |a| \text{ et } ab > 0 \\ 0 & \text{if } ab \leq 0 \end{cases} \quad (4.1.15)$$

En utilisant ces flux dans le schéma (4.1.11) on obtient le schéma de discrétisation de l'équation de la conservation de la masse totale pour les *mailles régulières*.

Pour les mailles à proximité du front on utilise la stratégie testée dans le chapitre 2.

Contrairement au chapitre 2, dans le problème présent la vitesse de la propagation n'est plus une constante donnée, elle varie en fonction de la position du front et du temps. On considère trois cas possibles :

CAS A : Au temps t^{n+1} le front ne change pas de maille.

CAS B : Au temps t^{n+1} le front change de maille à droite.

CAS C : Au temps t^{n+1} le front change de maille à gauche.

On présente ici les équations pour le CAS A et B. On peut toujours obtenir les équations pour le CAS C en écrivant les équations symétriques par rapport à celles du CAS B.

Dans le problème présent il y a deux fronts. On écrit ici les équations pour un front. Elles sont identiques pour le deuxième front. On note x_F^n la position du front au temps t^n et i_f^n le numéro de la cellule contenant le front. Le front ne se trouve pas forcément au milieu de la maille respective i_f .

CAS A : Au temps t^{n+1} le front ne change pas de maille.

On va combiner deux formulations numériques différentes dans ces mailles.

Formulation 1

Dans la formulation 1 on effectue des bilans conservatifs de type volume finis

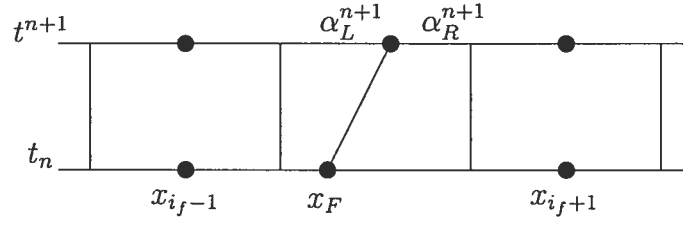


FIG. 4.1.2. CAS A : le front ne change pas de maille.

dans chacune des mailles $i_f^{n+1} - 1$, L^{n+1} , R^{n+1} , et $i_f^{n+1} + 1$ de la même façon qu'au chapitre 2 et 3. On note que le flux de la masse au front est zéro. D'autre part, à partir de ces bilans et on utilisant le schéma de Crank-Nicolson on obtient la solution au temps t^{n+1} pour les mailles suivantes :

$$\begin{aligned} \rho_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} &= \rho_{i_f-1}^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} - F_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1}] \\ &\quad + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f-3/2}^n - F_{i_f-1/2}^n] \\ \rho_L^{n+1} &= \frac{\alpha_L^n \rho_L^n + \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1} + F_{i_f-1/2}^n)}{\alpha_L^{n+1}} \\ \rho_R^{n+1} &= \frac{\alpha_R^n \rho_R^n - \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + F_{i_f+1/2}^n)}{\alpha_R^{n+1}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} &= \rho_{i_f+1}^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1}] \\ &\quad + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f+1/2}^n - F_{i_f+3/2}^n] \end{aligned}$$

Encore une fois on remarque que le problème de cette formulation 1 est dans la limite où α_L ou α_R devient très petit, voir nul, à cause des divisions dans les expressions pour ρ_L^{n+1} et ρ_R^{n+1} .

Formulation 2

On rappelle brièvement la formulation 2 décrite au chapitre 2.

Premièrement, on effectue des bilans conservatifs de type volume finis dans les mailles *équivalente-gauche* et *équivalente-droite*. On obtient la solution ρ_{EL}^{n+1} et ρ_{ER}^{n+1} au temps $n + 1$.

Deuxièmement, on calcule alors la solution pour les mailles *gauche* et *droite* par intégration numérique des polynômes $P_L(x_{EL}, x_{i_f-2})$ et $P_R(x_{ER}, x_{i_f+2})$.

La formulation 2 est robuste. Elle n'a pas la contrainte de division par un nombre (α_L, α_R) très petit ou zéro.

$$\rho_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} = \frac{dx + \alpha_L^{n+1}}{dx} \rho_{EL}^{n+1} - \frac{\alpha_L^{n+1}}{dx} \rho_L^{n+1}$$

$$\rho_{EL}^{n+1} = \frac{\alpha_L^n \rho_L^n + dx \rho_{i_f^n-1}^n + \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} + F_{i_f^n-3/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})}$$

$$\rho_L^{n+1} = (E_L^{n+1} \rho_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1} \rho_{i_f^n-2}^n)$$

$$\rho_R^{n+1} = (E_R^{n+1} \rho_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1} \rho_{i_f^n+2}^n)$$

$$\rho_{ER}^{n+1} = \frac{\alpha_R^n \rho_R^n + dx \rho_{i_f^n+1}^n - \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} + F_{i_f^n+3/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

$$\rho_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} = \frac{dx + \alpha_R^{n+1}}{dx} \rho_{ER}^{n+1} - \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \rho_R^{n+1}$$

avec E_L , E_R , F_L et F_R définis par

$$E_L^{n+1} = (3dx + \alpha_L^{n+1}) / (2dx + \alpha_L^{n+1})$$

$$F_L^{n+1} = dx / (2dx + \alpha_L^{n+1})$$

$$E_R^{n+1} = (3dx + \alpha_R^{n+1}) / (2dx + \alpha_R^{n+1})$$

$$F_R^{n+1} = dx / (2dx + \alpha_R^{n+1})$$

Formulation combinée

Pour les mêmes raisons discutées dans le chapitre 3, on met en oeuvre la formulation combinée obtenue par la moyenne pondérée entre la formulation 1 et la formulation 2. On obtient alors

$$\begin{aligned}\rho_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} &= \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right) (\rho_{i_f^n-1}^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} - F_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1}] \\ &\quad + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^n-3/2}^n - F_{i_f^n-1/2}^n]) \\ &\quad + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right)\right] \left(\frac{(dx + \alpha_L^{n+1})\rho_{EL}^{n+1} - \alpha_L^{n+1}\rho_L^{n+1}}{dx}\right)\end{aligned}$$

$$\rho_{EL}^{n+1} = \frac{\alpha_L^n \rho_L^n + dx \rho_{i_f^n-1}^n + \frac{dt}{2} (F_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} + F_{i_f^n-3/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})}$$

$$\begin{aligned}\rho_L^{n+1} &= \frac{\alpha_L^{n+1}}{dx} \left[\frac{\alpha_L^n \rho_L^n + \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}-1/2}^{n+1} + F_{i_f^n-1/2}^n)}{\alpha_L^{n+1}} \right] \\ &\quad + \left(1 - \frac{\alpha_L^{n+1}}{dx}\right) [E_L^{n+1} \rho_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1} \rho_{i_f^n-2}^n]\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\rho_R^{n+1} &= \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \left[\frac{\alpha_R^n \rho_R^n - \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + F_{i_f^n+1/2}^n)}{\alpha_R^{n+1}} \right] \\ &\quad + \left(1 - \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right) [E_R^{n+1} \rho_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1} \rho_{i_f^n+2}^n]\end{aligned}$$

$$\rho_{ER}^{n+1} = \frac{\alpha_R^n \rho_R^n + dx \rho_{i_f^n+1}^n - \frac{dt}{2} (F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} + F_{i_f^n+3/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

$$\begin{aligned}\rho_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} &= \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right) (\rho_{i_f^n+1}^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1}] \\ &\quad + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^n+1/2}^n - F_{i_f^n+3/2}^n]) \\ &\quad + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx}\right)\right] \left(\frac{(dx + \alpha_R^{n+1})\rho_{ER}^{n+1} - \alpha_R^{n+1}\rho_R^{n+1}}{dx}\right)\end{aligned}$$

CAS B : Le front change de maille à droite :

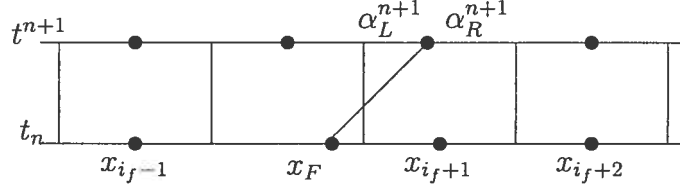


FIG. 4.1.3. CAS B : le front change de maille à droite.

Comme dans le problème d'advection, dans le cas où le front change de maille à droite, pour mettre à jour la solution dans les mailles à gauche du front on utilise la formulation 2 et pour les mailles à droite du front, la formulation combinée. La formulation 2 demande uniquement le bilan conservatif pour la maille *équivalente*. Dans le CAS B on écrit donc les bilans conservatifs pour les mailles suivantes : Pour côté gauche, la maille EL^{n+1} et pour côté droit, les mailles R^{n+1} , $i_f^{n+1} + 1$. En utilisant le schéma de Crank-Nicolson on écrit :

$$\begin{aligned} \rho_{i_f^{n+1}-1}^{n+1} &= \frac{dx + \alpha_L^{n+1}}{dx} \rho_{EL}^{n+1} - \frac{\alpha_L^{n+1}}{dx} \rho_L^{n+1} \\ \rho_{EL}^{n+1} &= \frac{\alpha_L^n \rho_L^n + dx \rho_{i_f^n-1}^n + \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}-3/2}^{n+1} + F_{i_f^n-1/2}^n)}{(dx + \alpha_L^{n+1})} \\ \rho_L^{n+1} &= (E_L^{n+1} \rho_{EL}^{n+1} - F_L^{n+1} \rho_{i_f^n-2}^n) \\ \rho_R^{n+1} &= \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \left[\frac{\alpha_R^n \rho_R^n + dx \rho_{i_f^n+1}^n - \frac{1}{2} dt (F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} + F_{i_f^n+3/2}^n)}{\alpha_R^{n+1}} \right] \\ &\quad + \left(1 - \frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) \left[E_R^{n+1} \rho_{ER}^{n+1} - F_R^{n+1} \rho_{i_f^n+2}^n \right] \end{aligned}$$

$$\rho_{ER}^{n+1} = \frac{\alpha_R^n \rho_R^n + dx \rho_{i_f+1}^n + dx \rho_{i_f+2}^n - \frac{dt}{2} (F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1} + F_{i_f^n+5/2}^n)}{(dx + \alpha_R^{n+1})}$$

$$\begin{aligned} \rho_{i_f^{n+1}+1}^{n+1} &= \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) (\rho_{i_f+2}^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^{n+1}+1/2}^{n+1} - F_{i_f^{n+1}+3/2}^{n+1}] \\ &\quad + \frac{dt}{2dx} [F_{i_f^n+3/2}^n - F_{i_f^n+5/2}^n]) \\ &\quad + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) \right] \left(\frac{(dx + \alpha_R^{n+1}) \rho_{ER}^{n+1} - \alpha_R^{n+1} \rho_R^{n+1}}{dx} \right) \end{aligned}$$

avec E_L , E_R , F_L et F_R déjà définis

4.1.3. Approche numérique pour l'équation de la pression

P^{n+1} est obtenue par le schéma conservatif en énergie (4.1.9).

Dans la version eulérienne de [1], la formule pour la pression était discrétisée selon

$$P^{n+1} = P^n \cdot \frac{\sum_i \frac{\Delta x}{\gamma_i^n - 1}}{\sum_i \frac{\Delta x}{\gamma_i^{n+1} - 1}}. \quad (4.1.16)$$

Pour tenir compte du suivi de front, on modifie l'intégration numérique comme suit.

On utilise des notations similaires auparavant, γ_l est la valeur de γ pour la maille à gauche du front et γ_r est la valeur de γ pour la maille à droite du front.

On remarque que :

Pour la première interface Σ^a , $\gamma_l = \gamma_l^{\Sigma^a}$ et $\gamma_r = \gamma_r^{\Sigma^a}$ et pour la deuxième interface Σ^b , $\gamma_l = \gamma_l^{\Sigma^b}$ et $\gamma_r = \gamma_r^{\Sigma^b}$; donc

$$\begin{aligned} I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i - 1} \right) &= \sum_i^{i_{f1}-1} \frac{dx}{\gamma_i - 1} + \frac{\alpha_L^{\Sigma^a}}{\gamma_l^{\Sigma^a} - 1} + \frac{\alpha_R^{\Sigma^a}}{\gamma_r^{\Sigma^a} - 1} + \\ &\quad \sum_{i=i_{f1}+1}^{i_{f2}-1} \frac{dx}{\gamma_i - 1} + \frac{\alpha_L^{\Sigma^b}}{\gamma_l^{\Sigma^b} - 1} + \frac{\alpha_R^{\Sigma^b}}{\gamma_r^{\Sigma^b} - 1} + \\ &\quad \sum_{i=i_{f2}+1}^N \frac{dx}{\gamma_i - 1}. \end{aligned}$$

4.1.4. Approche numérique pour l'équation de la vitesse

Similairement, on reprend l'équation discrète de la vitesse.

$$u_{i+1/2}^{n+1} = u_{i-1/2}^{n+1} + dx G_i^{n+1}$$

où

$$G_i^{n+1} = -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_i^{n+1}. \quad (4.1.17)$$

La quantité $\mathcal{P}'(P, T, \Sigma)$ intervenant dans (4.1.17) est définie comme :

$$\mathcal{P}'(P, T, \Sigma) = \beta_2^1 \cdot \frac{[\lambda DT]_{\Sigma^b} - [\lambda DT]_{\Sigma^a}}{\sum_i \frac{dx}{\gamma_i}}. \quad (4.1.18)$$

Comme dans l'équation de la pression on effectue une intégration numérique plus précise, tenant compte de la position de chaque front.

La somme $\sum_i \frac{dx}{\gamma_i}$ devient

$$I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i} \right) = \sum_i^{i_{f1}-1} \frac{dx}{\gamma_i} + \frac{\alpha_L^{\Sigma^a}}{\gamma_l^{\Sigma^a}} + \frac{\alpha_R^{\Sigma^a}}{\gamma_r^{\Sigma^a}} + \sum_{i=i_{f1}+1}^{i_{f2}-1} \frac{dx}{\gamma_i} + \frac{\alpha_L^{\Sigma^b}}{\gamma_l^{\Sigma^b}} + \frac{\alpha_R^{\Sigma^b}}{\gamma_r^{\Sigma^b}} + \sum_{i=i_{f2}+1}^N \frac{dx}{\gamma_i}.$$

Pour approcher les flux de chaleur au front $[\lambda DT]_{\Sigma^a}$ et $[\lambda DT]_{\Sigma^b}$ on utilise les stratégies testées dans le chapitre 3 (problème de Stefan).

4.1.4.1. Une approximation d'ordre deux pour le flux de chaleur

Afin d'améliorer la convergence, on construit des approximations d'ordre 2 pour les flux de chaleur à proximité du front. Pour les points réguliers on utilise une approximation centrée d'ordre 2 de ces flux.

Formulation 1

Comme dans le chapitre 3, on définit les polynômes P_L et P_R comme étant respectivement le polynôme défini à partir des points à gauche du front et le polynôme défini à partir des points à droite du front.

Pour la formulation 1 on a :

$$P_{L_1}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_L, T_L) \quad (x_{i_f-1}, T_{i_f-1})]$$

$$P_{R_1}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_R, T_R) \quad (x_{i_f+1}, T_{i_f+1})]$$

On effectue l'interpolation polynômiale, on calcule $P'_L(x_{i_f-1/2})$, $P'_L(x_F)$, $P'_R(x_{i_f-1/2})$ et $P'_R(x_F)$ et on écrit les flux de chaleur :

1)

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f-1/2,1} = & -T_{i_f-1} \left[\frac{6\alpha_L}{(dx + \alpha_L)(dx + 2\alpha_L)} \right] - T_L \left[\frac{2(dx - 2\alpha_L)}{(dx + \alpha_L)\alpha_L} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(dx - \alpha_L)}{(dx + 2\alpha_L)\alpha_L} \right] \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f+1/2,1} = & T_{i_f+1} \left[\frac{6\alpha_R}{(dx + \alpha_R)(dx + 2\alpha_R)} \right] + T_R \left[\frac{2(dx - 2\alpha_R)}{(dx + \alpha_R)\alpha_R} \right] \\ & - T_F \left[\frac{2(dx - \alpha_R + dx)}{(dx + 2\alpha_R)\alpha_R} \right] \end{aligned}$$

3)

$$\begin{aligned} (DT)_{F,L,1} = & T_{i_f-1} \left[\frac{2\alpha_L}{(dx + \alpha_L)(dx + 2\alpha_L)} \right] - T_L \left[\frac{2(2\alpha_L + dx)}{(dx + \alpha_L)\alpha_L} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(3\alpha_L + dx)}{(dx + 2\alpha_L)\alpha_L} \right] \end{aligned}$$

4)

$$\begin{aligned} (DT)_{F,R,1} = & -T_{i_f+1} \left[\frac{2\alpha_R}{(dx + \alpha_R)(dx + 2\alpha_R)} \right] + T_R \left[\frac{2(2\alpha_R + dx)}{(dx + \alpha_R)\alpha_R} \right] \\ & - T_F \left[\frac{2(3\alpha_R + dx)}{(dx + 2\alpha_R)\alpha_R} \right] \end{aligned}$$

Pour la suite on utilise les notations suivantes :

$$(\lambda DT)_{i_f-1/2,1} = \lambda_{i_f-1/2} [\Sigma^a T_{i_f-1} + e_1 T_L + d_1 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{i_f+1/2,1} = \lambda_{i_f+1/2} [w_1 T_{i_f+1} + m_1 T_R + l_1 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{F,L,1} = \lambda_{F,L} [c_1 T_{i_f-1} + b_1 T_L + a_1 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{F,R,1} = \lambda_{F,R} [k_1 T_{i_f+1} + j_1 T_R + g_1 T_F]$$

Formulation 2

Comme dans le chapitre 3, on définit $T_{E,L}$ et $T_{E,R}$, les polynômes P_L et P_R

$$P_{L_2}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_{E,L}, T_{E,L}) \quad (x_{i_f-2}, T_{i_f-2})]$$

$$P_{R_2}(x) = P[(x_F, T_F) \quad (x_{E,R}, T_{E,R}) \quad (x_{i_f+2}, T_{i_f+2})],$$

On effectue l'interpolation polynômiale et on obtient les approximations suivantes :

1)

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f-1/2,2} = & -T_{i_f-2} \left[\frac{2(3\alpha_L - dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] + T_{E,L} \left[\frac{2(2\alpha_L - 3dx)}{(dx + \alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] \\ & - T_F \left[\frac{2(\alpha_L - 4dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(dx + \alpha_L)} \right] \end{aligned}$$

2)

$$\begin{aligned} (DT)_{i_f+1/2,2} = & T_{i_f+2} \left[\frac{2(3\alpha_R - dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] - T_{E,R} \left[\frac{2(2\alpha_R - 3dx)}{(dx + \alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(\alpha_R - 4dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R)} \right] \end{aligned}$$

3)

$$\begin{aligned} (DT)_{F,L,2} = & T_{i_f-2} \left[\frac{2(\alpha_L + dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] - T_{E,L} \left[\frac{2(2\alpha_L + 3dx)}{(dx + \alpha_L)(2dx + \alpha_L)} \right] \\ & + T_F \left[\frac{2(3\alpha_L + 4dx)}{(3dx + 2\alpha_L)(dx + \alpha_L)} \right] \end{aligned}$$

4)

$$(DT)_{F,R,2} = -T_{i_f+2} \left[\frac{2(\alpha_R + dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] + T_{E,R} \left[\frac{2(2\alpha_R + 3dx)}{(dx + \alpha_R)(2dx + \alpha_R)} \right] \\ - T_F \left[\frac{2(3\alpha_R + 4dx)}{(3dx + 2\alpha_R)(dx + \alpha_R)} \right]$$

Pour la suite on utilise les notations suivantes :

$$(\lambda DT)_{i_f-1/2,2} = \lambda_{i_f-1/2} [\Sigma^b T_{i_f-2} + e_2 T_{E_L} + d_2 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{i_f+1/2,2} = \lambda_{i_f+1/2} [w_2 T_{i_f+2} + m_2 T_{E_R} + l_2 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{F,L,2} = \lambda_{F,L} [c_2 T_{i_f-2} + b_2 T_{E_L} + a_2 T_F]$$

$$(\lambda DT)_{F,R,2} = \lambda_{F,R} [k_2 T_{i_f+2} + j_2 T_{E_R} + g_2 T_F]$$

La formulation combinée

On met en oeuvre une formulation combinée créée par une moyenne entre la formulation 1 et la formulation 2.

Pour le flux de chaleur au front on obtient les formules suivantes.

Pour le côté gauche du front :

$$[\lambda DT]_{F,L} = \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx} \right) (Formulation\ 1) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_L^{n+1}}{dx} \right) \right] (Formulation\ 2)$$

et donc

$$[DT]_{F,L} = \left[a_1 \frac{\alpha_L}{dx} + a_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] T_F + \left[b_1 \frac{\alpha_L}{dx} \right] T_L + \left[b_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] T_{E_L} \\ + \left[c_1 \frac{\alpha_L}{dx} \right] T_{i_f-1} + \left[c_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] T_{i_f-2}$$

Pour le côté droit on a

$$[\lambda DT]_{F,R} = \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) (Formulation\ 1) + \left[1 - \left(\frac{\alpha_R^{n+1}}{dx} \right) \right] (Formulation\ 2)$$

et donc

$$[DT]_{F,R} = \left[g_1 \frac{\alpha_R}{dx} + g_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] T_F + \left[j_1 \frac{\alpha_R}{dx} \right] T_R + \left[j_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] T_{ER} \\ + \left[k_1 \frac{\alpha_R}{dx} \right] T_{i_f+1} + \left[k_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] T_{i_f+2}$$

Le flux de chaleur est continu à travers le front, on peut donc écrire

$$[\lambda DT]_{\Sigma^a} = [\lambda DT]_F = [\lambda DT]_{F,L} = [\lambda DT]_{F,R}$$

On peut maintenant approcher numériquement $\mathcal{P}'(P^n, T^n, \Sigma^n)$ par

$$\mathcal{P}'(P, T, \Sigma) = \beta_2^1 \cdot \frac{[\lambda DT]_{\Sigma^b} - [\lambda DT]_{\Sigma^a}}{I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i} \right)}. \quad (4.1.19)$$

avec $[\lambda DT]_{\Sigma^b}$, $[\lambda DT]_{\Sigma^a}$ et $I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i} \right)$ définies plus haut.

On rappelle l'équation de la vitesse

$$u_{i+1/2}^{n+1} = u_{i-1/2}^{n+1} + dx G_i^{n+1}$$

avec

$$G_i^{n+1} = - \frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_i^{n+1}. \quad (4.1.20)$$

On effectue ici l'intégration spatiale en t^{n+1} et pour toutes les *mailles régulières* on obtient :

$$u_{i+1/2}^{n+1} - u_{i-1/2}^{n+1} = dx G_i^{n+1} \\ = - \frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} dx + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_i^{n+1} dx \\ = - \frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} dx + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot ([\lambda DT]_{i+1/2}^{n+1} - [\lambda DT]_{i-1/2}^{n+1}).$$

avec

$$[\lambda DT]_{i+1/2} = \lambda_{i+1/2} \frac{T_{i+1} - T_i}{dx}$$

$$[\lambda DT]_{i-1/2} = \lambda_{i-1/2} \frac{T_i - T_{i-1}}{dx}$$

L'intégration change légèrement dans les mailles proches du front et surtout dans la maille où se trouve le front.

Pour la maille $i_f - 1$

$$\begin{aligned} u_{i_f-1/2}^{n+1} - u_{i_f-3/2}^{n+1} &= dx G_{i_f-1}^n \\ &= -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_{i_f-1}^{n+1} P^{n+1}} dx + \frac{\gamma_{i_f-1}^{n+1}}{\gamma_{i_f-1}^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_{i_f-1}^{n+1} dx. \end{aligned}$$

avec

$$[D\lambda DT]_{i_f-1} = \frac{[\lambda DT]_{i_f-1/2} - [\lambda DT]_{i_f-3/2}}{dx}$$

Pour la maille L

$$\begin{aligned} u_F^{n+1} - u_{i_f-1/2}^{n+1} &= \alpha_L^{n+1} G_L^{n+1} \\ &= -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_L^{n+1} P^{n+1}} \alpha_L^{n+1} + \frac{\gamma_L^{n+1}}{\gamma_L^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_L^{n+1} \alpha_L^{n+1}. \end{aligned}$$

avec

$$[D\lambda DT]_L = \frac{[\lambda DT]_F - [\lambda DT]_{i_f-1/2}}{\alpha_L}$$

De façon similaire, pour la maille R

$$\begin{aligned} u_{i_f+1/2}^{n+1} - u_F^{n+1} &= \alpha_R^{n+1} G_R^{n+1} \\ &= -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_R^{n+1} P^{n+1}} \alpha_R^{n+1} + \frac{\gamma_R^{n+1}}{\gamma_R^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_R^{n+1} \alpha_R^{n+1}. \end{aligned}$$

avec

$$[D\lambda DT]_R = \frac{[\lambda DT]_{i_f+1/2} - [\lambda DT]_F}{\alpha_R}$$

Et finalement pour la maille $i_f + 1$ on obtient

$$\begin{aligned} u_{i_f+3/2}^{n+1} - u_{i_f+1/2}^{n+1} &= dx G_{i_f+1}^{n+1} \\ &= -\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_{i_f+1}^{n+1} P^{n+1}} dx + \frac{\gamma_{i_f+1}^{n+1}}{\gamma_{i_f+1}^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_{i_f+1}^{n+1} dx \end{aligned}$$

avec

$$[D\lambda DT]_{i_f+1} = \frac{[\lambda DT]_{i_f+3/2} - [\lambda DT]_{i_f+1/2}}{dx}$$

4.1.5. Approche numérique pour l'équation de la température

Connaissant P^{n+1} , le champ de la température T^{n+1} est alors calculé via

$$T_i^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{R_i^{n+1} \rho_i^{n+1}} \quad (4.1.21)$$

pour les *mailles régulières* et via

$$T_L^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{R_L^{n+1} \rho_L^{n+1}} \quad (4.1.22)$$

et

$$T_R^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{R_R^{n+1} \rho_R^{n+1}} \quad (4.1.23)$$

respectivement pour les mailles L et R .

En utilisant la propriété de la continuité du flux de chaleur à travers le front

$$[\lambda DT]_F^{n+1} = [\lambda DT]_{F,L}^{n+1} = [\lambda DT]_{F,R}^{n+1}$$

on peut obtenir la température au front T_F^{n+1} .

$$T_F^{n+1} = \frac{P^{n+1}}{R^{n+1}}$$

avec

$$\begin{aligned} P = & \lambda_{F,R} \left(\left[j_1 \frac{\alpha_R}{dx} \right] T_R + \left[j_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] T_{ER} + \left[k_1 \frac{\alpha_R}{dx} \right] T_{i_f+1} + \left[k_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] T_{i_f+2} \right) \\ & - \lambda_{F,L} \left(\left[b_1 \frac{\alpha_L}{dx} \right] T_L + \left[b_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] T_{EL} + \left[c_1 \frac{\alpha_L}{dx} \right] T_{i_f-1} + \left[c_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] T_{i_f-2} \right) \end{aligned}$$

$$R = \left(\lambda_{F,L} \left[a_1 \frac{\alpha_L}{dx} + a_2 \left(1 - \frac{\alpha_L}{dx} \right) \right] - \lambda_{F,R} \left[g_1 \frac{\alpha_R}{dx} + g_2 \left(1 - \frac{\alpha_R}{dx} \right) \right] \right)$$

On complète ainsi la discrétisation numérique du système diphasique bas Mach.

4.2. ALGORITHME ITÉRATIF

Rappelons le schéma de discrétisation pour le système diphasique bas Mach.

$$\begin{aligned}\rho_i^{n+1} &= \rho_i^n + \frac{dt}{2dx} [F_{i-1/2}^{n+1} - F_{i+1/2}^{n+1}] + \frac{dt}{2dx} [F_{i-1/2}^n - F_{i+1/2}^n] \\ P^{n+1} &= P^n \cdot \frac{I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i^n - 1} \right)}{I_i \left(\frac{dx}{\gamma_i^{n+1} - 1} \right)}. \\ u_{i+1/2}^{n+1} &= u_{i-1/2}^{n+1} + dx \left[-\frac{\mathcal{P}'(P^{n+1}, T^{n+1}, \Sigma^{n+1})}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} + \frac{\gamma_i^{n+1} - 1}{\gamma_i^{n+1} P^{n+1}} \cdot [D\lambda DT]_i^{n+1} \right] \\ T_i^{n+1} &= \frac{P^{n+1}}{R_i^{n+1} \rho_i^{n+1}}.\end{aligned}\tag{4.2.1}$$

et la géométrie

$$\begin{aligned}\alpha_L^{n+1} &= \alpha_L^n + \frac{1}{2}(u_F^{n+1} + u_F^n)dt \\ \alpha_R^{n+1} &= dx - \alpha_L^{n+1} \\ x_F^{n+1} &= x_F^n + \frac{1}{2}(u_F^{n+1} + u_F^n)dt\end{aligned}\tag{4.2.2}$$

Le système discret (4.2.1)-(4.2.2) est donc clairement non linéaire. Comme dans le problème de Stefan, on propose une manière de résoudre le système non linéaire (4.2.1)-(4.2.2) en le fractionnant en deux parties linéaires, tel que décrit ci dessous.

En effet, on remarque que :

- Si la vitesse u_F , la position du front x_F , les parties α_L , α_R sont données alors le système (4.2.1) devient un système linéaire pour ρ , T et la vitesse u .
- Si la ρ , T et u sont donnés, on peut facilement résoudre les équations du système en ce qui concerne la géométrie (4.2.2) pour u_F , α_L , α_R et donc pour x_F .

On considère donc l'algorithme itératif suivant :

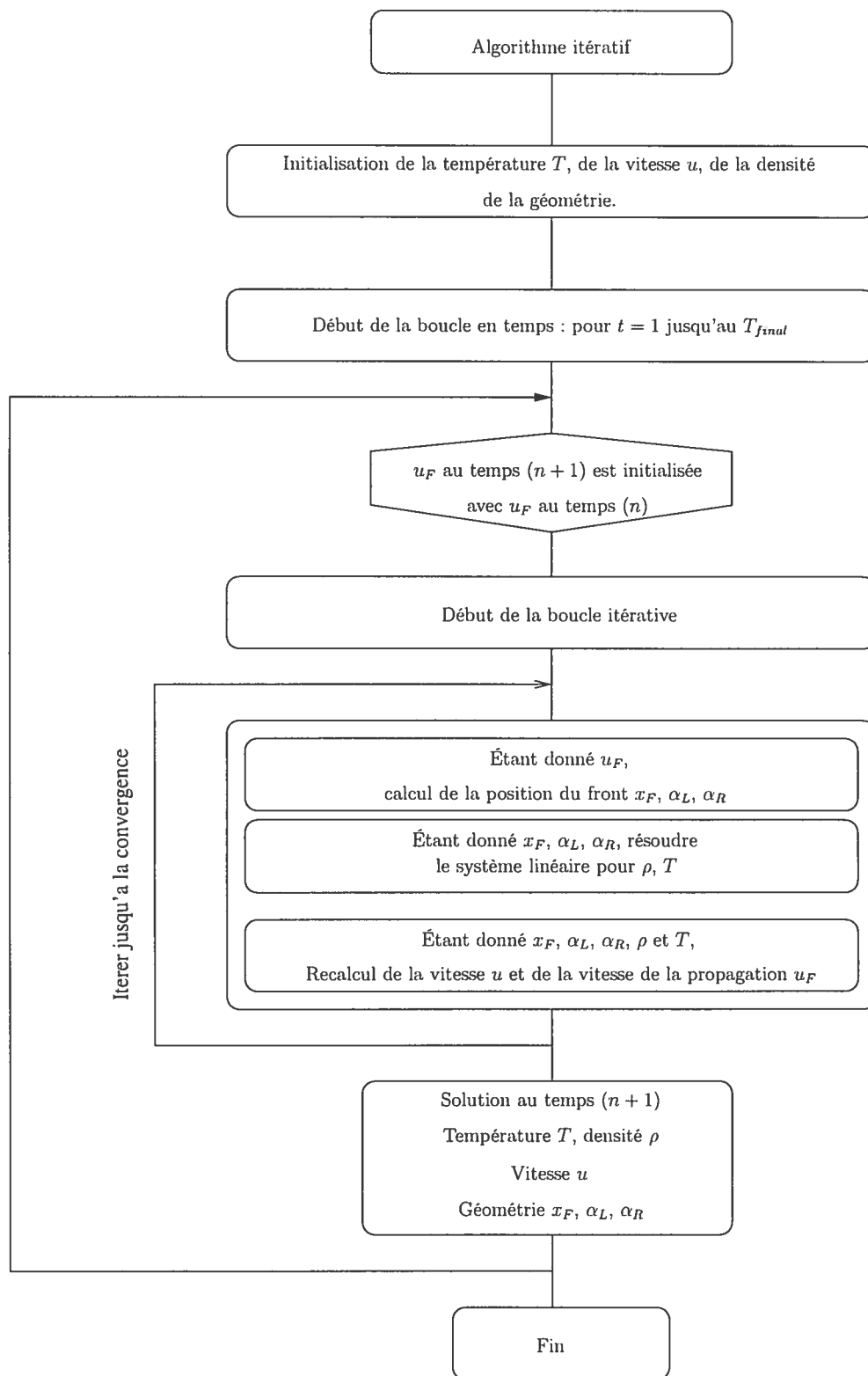


FIG. 4.2.1. Algorithmme itératif

4.3. RÉSULTATS NUMÉRIQUES ET CONCLUSIONS

On se propose dans ce paragraphe de tester le schéma numérique présenté dans ce chapitre. Le cas test étudié est similaire au cas test étudié par Dellacherie dans [1].

Les conditions initiales sont comme suit.

$\Omega =]0, 1[$, $\Sigma(t = 0) = \{\Sigma^a(t = 0), \Sigma^b(t = 0)\} = \{0.23, 0.77\}$ et la masse initiale dans $\Omega_2^a(t = 0)$ est identique à la masse initiale dans $\Omega_2^b(t = 0)$. On impose ainsi à la bulle $\Omega_1(t)$ de se déplacer vers le milieu de Ω lorsque le temps t tend vers l'infini.

La pression thermodynamique initiale $P(t = 0) = 200$ et le nombre de mailles est égal à N . Donc, on a $dx = 1/N$.

Le schéma de discrétisation numérique ne fonctionne que si le front ne traverse pas plus qu'une maille à la fois. Ceci est garanti si le pas de temps dt est tel que $dt = CFL * dx$ où $0 \leq CFL = \frac{u dt}{dx} \leq 1$.

On considère comme cas test le cas d'une compression de la bulle Ω_1 avec

$$\begin{aligned} x \in \Omega_2^a(t = 0) : T(t = 0, x) &= 1, 8, \\ x \in \Omega_1(t = 0) : T(t = 0, x) &= 2.5, \\ x \in \Omega_2^b(t = 0) : T(t = 0, x) &= 1.8 \end{aligned}$$

Connaissant les conditions initiales, on trouve que l'équilibre final est tel que (voir [1])

$$\begin{aligned} T^\infty &= 2.4259, \\ P^\infty &= 228.7934, \\ \rho^{\infty,1} &= 471.5556, \\ \rho^{\infty,2a} &= 134.7302, \\ \rho^{\infty,2b} &= 134.7302, \\ x_F^{\infty,a} &= 0.2710, \\ x_F^{\infty,b} &= 0.7290. \end{aligned}$$

Voici les graphiques de la solution, au temps $T = 1$ et au temps $T = 30$. Ce dernier temps est suffisamment grand que la solution asymptotique est observée tandis qu'au temps $T = 1$, on est dans phase transitoire. Nous présentons les figures de la solution et aussi de l'erreur correspondante. Nous expliquerons dans la section suivante comment cette erreur a été estimée.

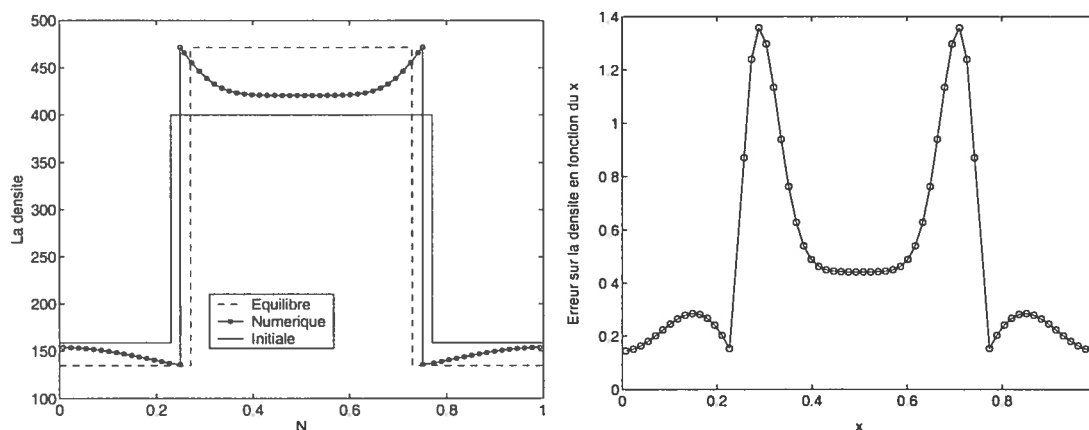


FIG. 4.3.1. Figure à gauche, densité, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la densité en fonction de x

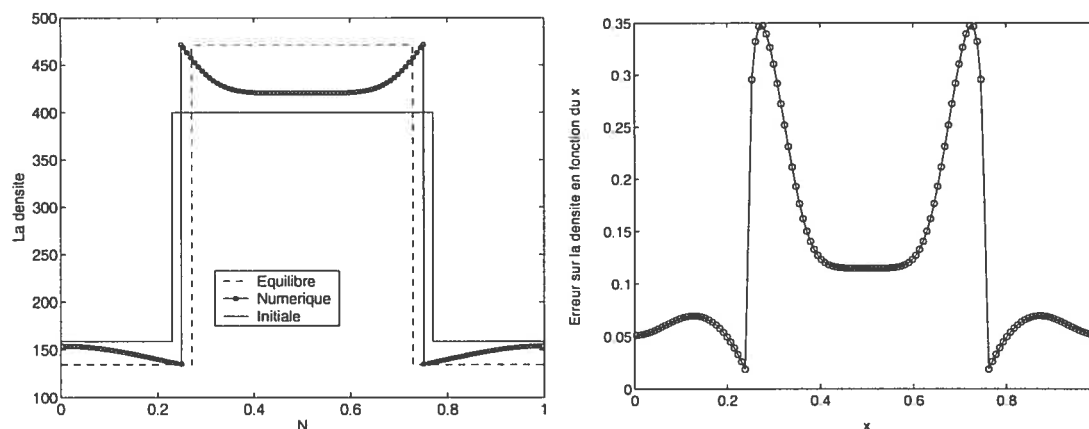


FIG. 4.3.2. Figure à gauche, densité, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la densité en fonction de x

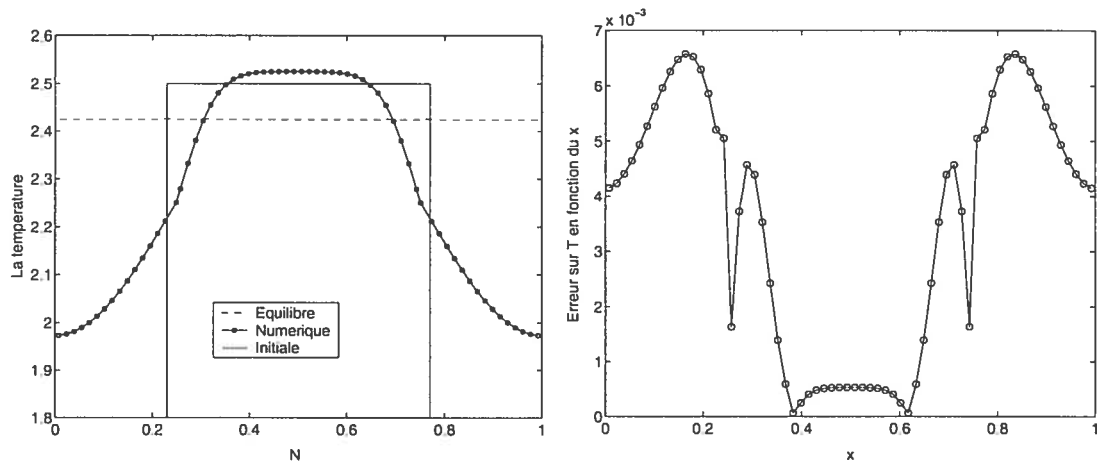


FIG. 4.3.3. Figure à gauche, température, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la température en fonction de x

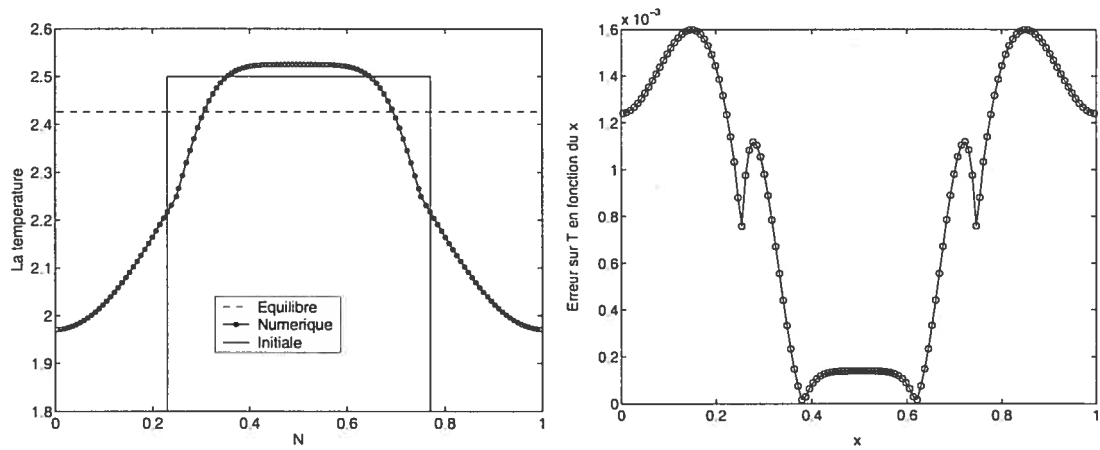


FIG. 4.3.4. Figure à gauche, température, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la température en fonction de x

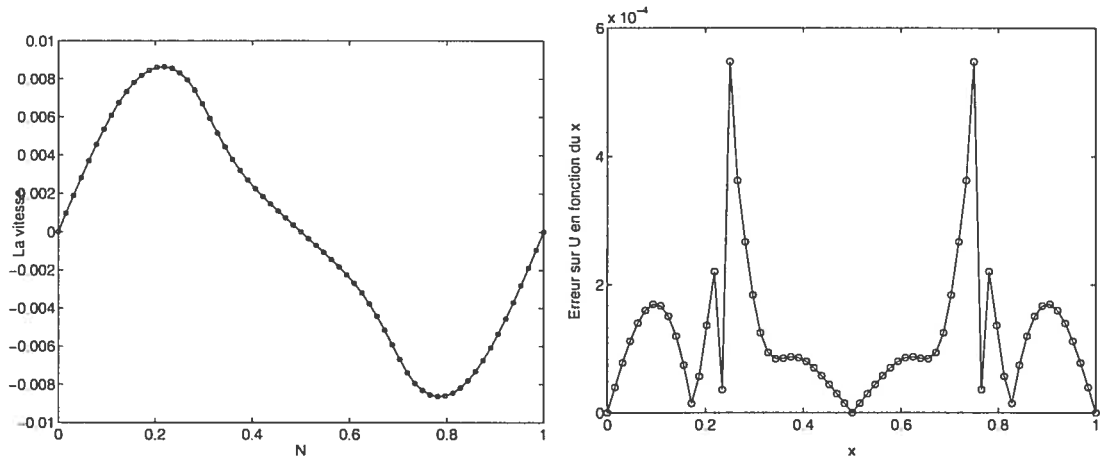


FIG. 4.3.5. Figure à gauche, vitesse, formulation combinée, $N = 64$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la vitesse en fonction de x

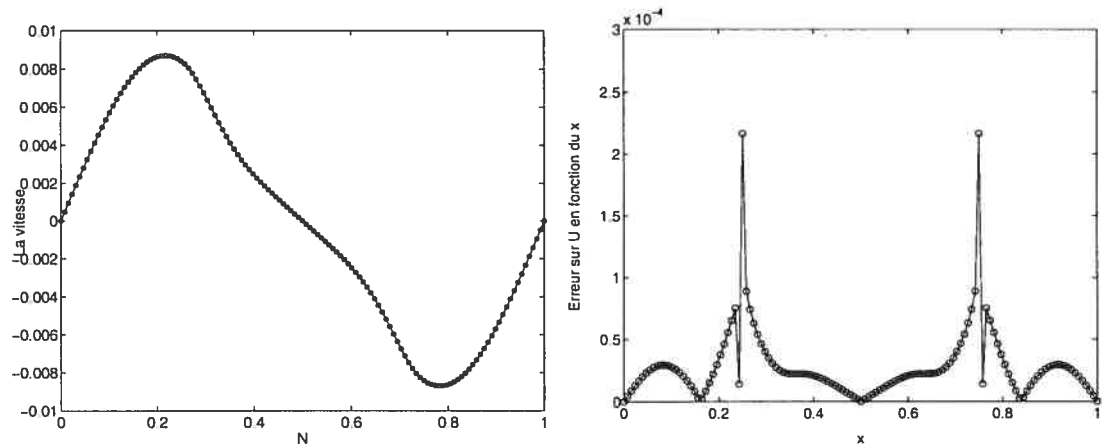


FIG. 4.3.6. Figure à gauche, vitesse, formulation combinée, $N = 128$, $T_{final} = 1$, $dt = dx/4$, figure à droite, erreur sur la vitesse en fonction de x

Dans les graphiques de l'erreur en fonction du x on remarque que en norme L^∞ l'erreur est d'ordre 2 pour la température et la densité. Pour la vitesse l'erreur en norme L^∞ semble d'être d'ordre moins que 2.

On remarque un bon accord entre la solution stationnaire et sa prédiction théorique.

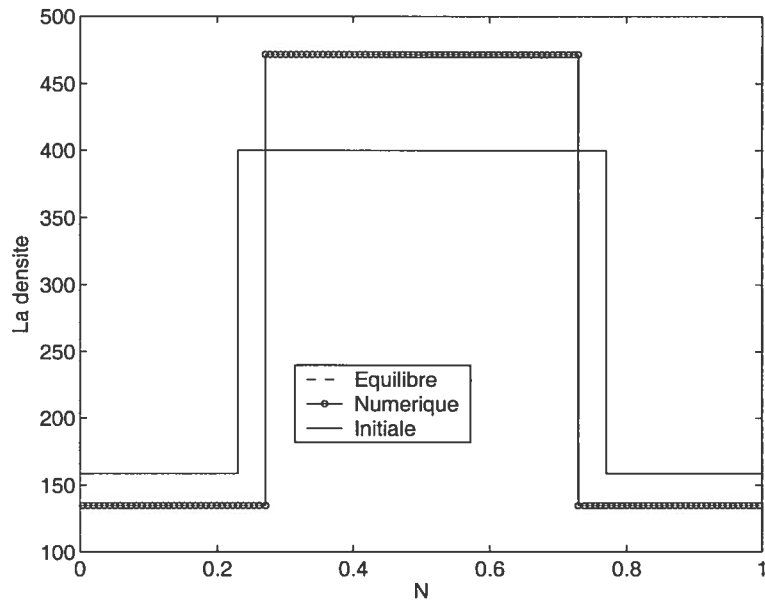


FIG. 4.3.7. Densité, formulation combinée, $N=128$, $T_{final} = 30$, $dt = dx/4$,

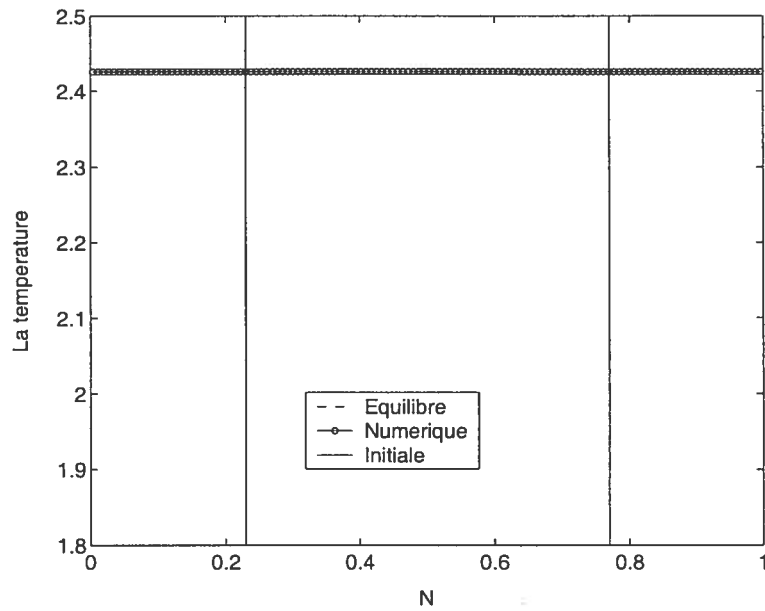


FIG. 4.3.8. Température, formulation combinée, $N=128$, $T_{final} = 30$, $dt = dx/4$,

4.3.1. Estimation d'erreur et ordre de convergence de la méthode avec suivi de front et de la méthode eulérienne de [1] pour le système diphasique bas Mach

On décrit ici la façon dont on a mesuré l'ordre de convergence de chaque méthode.

Dans la discrétisation numérique dans les deux méthodes la température et la densité sont évaluées dans les centres des mailles et la vitesse est évaluée dans les interfaces.

Pour mesurer l'ordre de la méthode, on effectue les tests de convergence sur chacune de ces quantités. On calcule l'erreur des différentes solutions grossières par rapport à une solution de référence. On prend comme solution de référence la solution calculée avec un maillage de $N = 2048$ points. On choisit les solutions plus grossières avec les maillages de 64, 128, 256, 512, 1024 points.

Les tests sur la température et sur la densité sont particuliers car ils demandent un soin spécial dans l'alignement des points choisis pour comparer la solution grossière avec la solution raffinée.

Dans la figure suivante on comprend que pour calculer l'erreur on ne peut pas choisir ni le point à gauche ni le point à droite. On prend alors une moyenne entre ces deux points. La nouvelle valeur moyennée sert pour comparer la solution grossière avec celle raffinée.

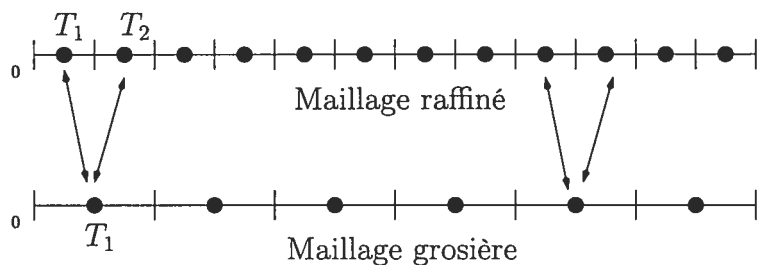


FIG. 4.3.9. Relation géométrique entre les maillages raffiné ou grossier

Pour la méthode avec suivi de front présentée dans ce mémoire on effectue les

tests suivant :

Test sur la température T :

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	3.6960e-003	
1/128	9.6428e-004	3.8329
1/256	2.2518e-004	4.2823
1/512	5.4803e-005	4.1089
1/1024	1.0693e-005	5.1251

TAB. 4.3.1. Température T , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction de dx

Le rapport affiché dans ce tableau présente le rapport des normes L_1 de l'erreur pour différents dx . On remarque que ce rapport est environ 4, c'est à dire que quand dx diminue d'un facteur de 2, la norme L_1 de l'erreur diminue d'un facteur de 4. Ceci permet d'évaluer l'ordre de la convergence de la méthode. On conclut donc que la méthode est d'ordre de précision 2. On note que les dernières valeurs

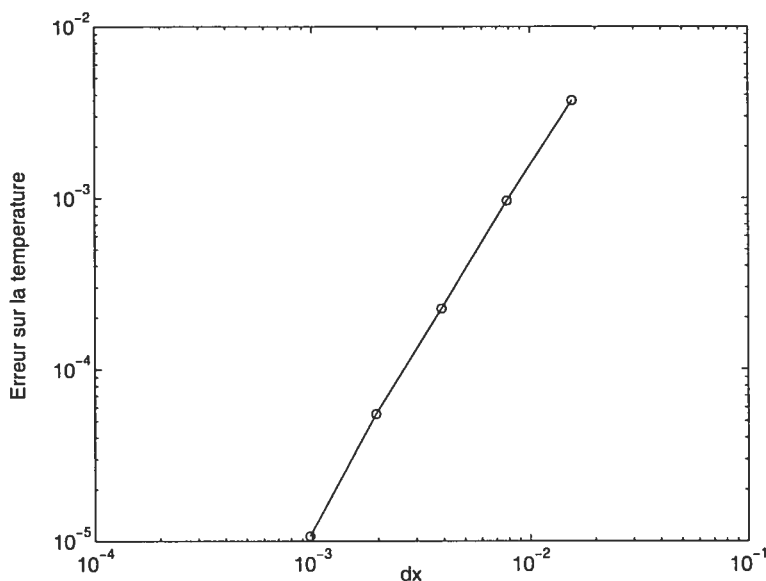


FIG. 4.3.10. Température, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$

pour $dx = 1/1024$ sont sans doute peu fiables parce que le maillage n'est pas très grossier comparativement à la solution de référence.

Test sur la vitesse U :

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	1.2176e-004	
1/128	2.8154e-005	4.3248
1/256	9.7236e-006	2.8954
1/512	2.1284e-006	4.5685
1/1024	4.3428e-007	4.9010

TAB. 4.3.2. Vitesse U , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

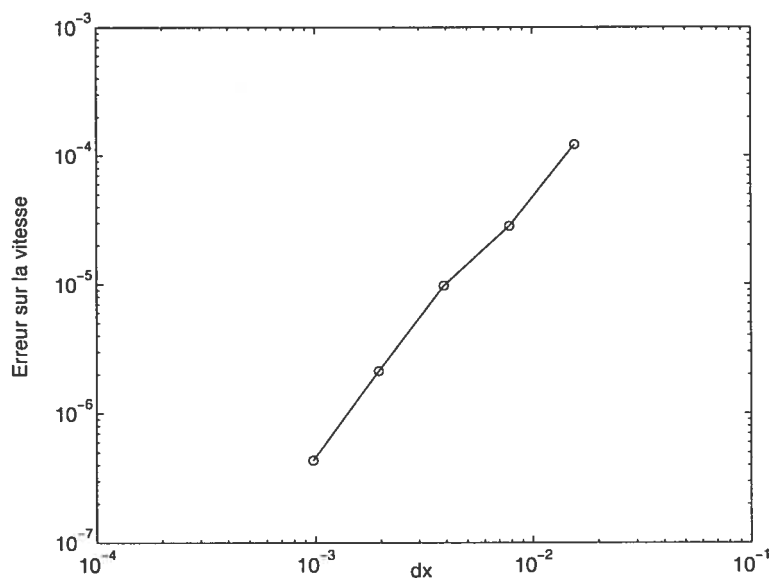


FIG. 4.3.11. Vitesse, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$

Test sur la densité ρ

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	7.4599e-001	
1/128	1.9206e-001	3.8842
1/256	4.6736e-002	4.1095
1/512	1.1243e-002	4.1569
1/1024	2.0988e-003	5.3569

TAB. 4.3.3. Densité ρ , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

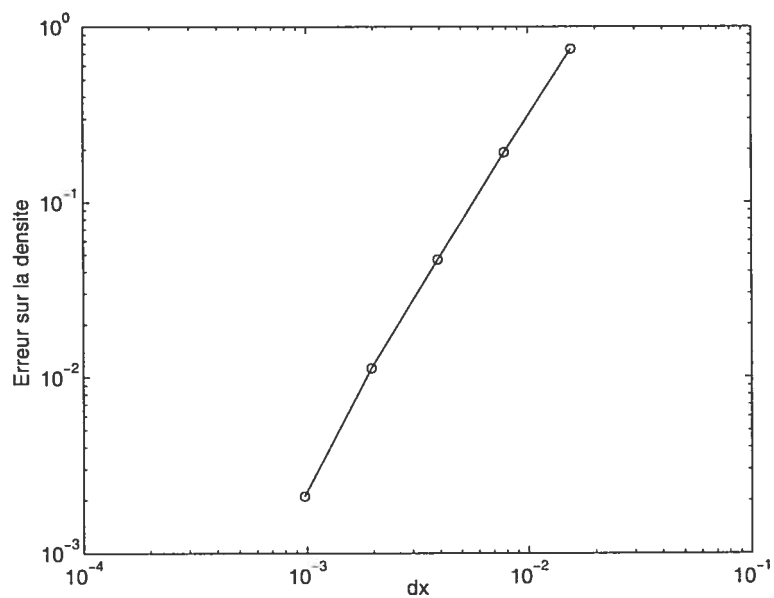


FIG. 4.3.12. Densité, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$

Test sur X_F

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	3.9462e-004	
1/128	1.0245e-004	3.8518
1/256	2.4899e-005	4.1146
1/512	5.9809e-006	4.1631
1/1024	1.1075e-006	5.4004

TAB. 4.3.4. Position du front X_F , tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

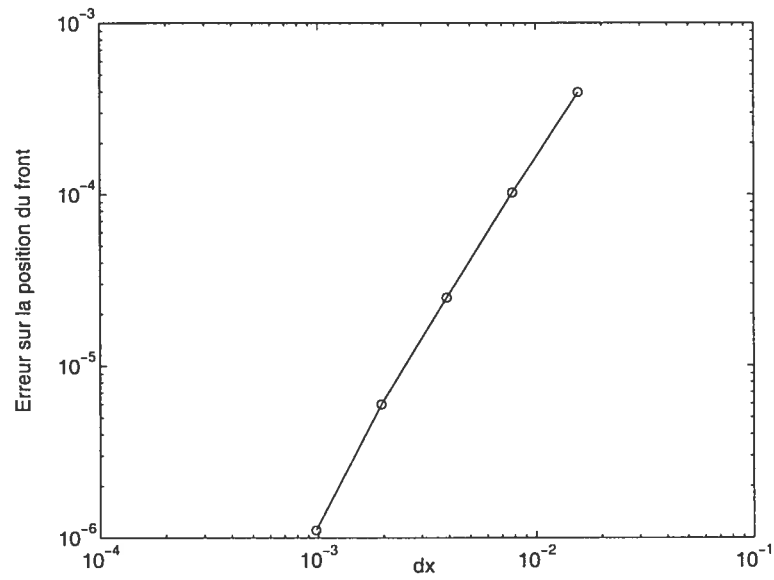


FIG. 4.3.13. Position du front, erreur en fonction de dx , $T_{final} = 0.6$, $dt = dx/4$

Pour la méthode eulérienne de [1], on a les tableaux suivants.

Test sur la température T

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	1.0131e-02	
1/128	4.8890e-03	2.0722
1/256	2.5689e-03	1.9031
1/512	1.0391e-03	2.4722
1/1024	3.3869e-04	3.0680

TAB. 4.3.5. Température T dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

Test sur la vitesse U

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	3.4320e-04	
1/128	2.1982e-04	1.5614
1/256	1.5790e-04	1.3920
1/512	1.2585e-04	1.2552
1/1024	7.3543e-05	1.7116

TAB. 4.3.6. Vitesse U dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

Test sur la densité ρ

De nouveau, les dernières valeurs pour $dx = 1/1024$ sont peu fiables parce que le maillage n'est pas très grossier comparativement à la solution de référence.

dx	Norme L_1 de l'erreur	Le rapport
1/64	5.9398e+00	
1/128	3.9259e+00	1.5130
1/256	2.3919e+00	1.6413
1/512	1.5992e+00	1.4957
1/1024	5.3543e-01	2.9868

TAB. 4.3.7. Densité ρ dans [1], tableau de la norme L_1 de l'erreur en fonction du dx

Test sur X_F

On ne effectue pas un test sur X_F car dans [1] le X_F coïncide toujours avec l'interface du maillage.

On remarque que le rapport pour la méthode de [1] est environ 2. On interprète alors que la norme L_1 de l'erreur diminue avec le même facteur de 2 que dx . Par contre pour la méthode de suivi de front le rapport est environ 4 donc la norme L_1 de l'erreur diminue deux fois plus vite (avec un facteur 4) que dx (dx diminue avec un facteur 2).

On conclut alors que la méthode présentée dans [1] est d'une ordre de précision 1, par contre la méthode de suivi de front présentée dans ce mémoire est d'ordre 2.

4.3.2. Comparaison de la méthode de suivi de front et de la méthode eulérienne de [1]

Pas de temps

Premièrement, on mentionne que la méthode eulérienne présentée dans [1] est une méthode explicite. Comme toute autre méthode explicite, elle a une contrainte dans le choix du pas de temps. Dans [1], le pas de temps choisi est proportionnel à dx^2 , il est tel que

$$dt < C \times dx^2 \times \frac{\min_i(\rho_i^n C_{p,i}^n)}{\max_i \lambda_i^n}$$

où $C_{p,i}^n \in \left\{ \frac{\gamma_{k=1} R_{k=1}}{\gamma_{k=1}-1}, \frac{\gamma_{k=2} R_{k=2}}{\gamma_{k=2}-1} \right\}$ est la capacité calorifique à pression constante dans la maille i et au temps t^n , $C=\text{constant}$.

Comparativement à la méthode eulérienne dans [1], la méthode de suivi de front demande moins d'itérations en temps.

Considérons l'exemple suivant :

Prenons $N = 512$, $T_{final} = 0.6$ et on fixe les conditions initiales. On calcule la solution avec la méthode eulérienne de [1] et avec la méthode avec suivi de front présentée dans ce mémoire. On remarque que les pas de temps sont :

dt, Méthode [1]	dt, Méthode avec suivi de front
9.5367e-005	3.2552e-004

TAB. 4.3.8. Pas de temps pour les deux méthodes

et le nombre d'itérations dans le temps sont : Clairement, la méthode de suivi de

Nombre d'itérations en temps, Méthode [1]	Nombre d'itérations en temps, Méthode avec suivi de front
10486	3072

TAB. 4.3.9. Nombre d'itérations pour les deux méthodes

front demande moins d'itérations dans le temps.

Représentation de l'interface

Deuxièmement, dans [1] le suivi d'interface est basé sur une approximation assez grossière où l'interface $\Sigma(t)$ coïncide toujours avec les interfaces du maillage eulérien. Ceci conduit à un manque de précision dans la résolution numérique du système.

Nous avons proposé une méthode eulérienne, plus précise où l'interface $\Sigma(t)$ est approximée par une fonction linéaire par morceaux. L'interface en tout temps n'est plus contrainte à coïncider avec les interfaces du maillage (voir figure 4.3.14).

Précision

Numériquement on peut observer l'erreur entre une solution de référence calculer avec un maillage assez raffiné et une solution grossière pour chacune des méthodes.

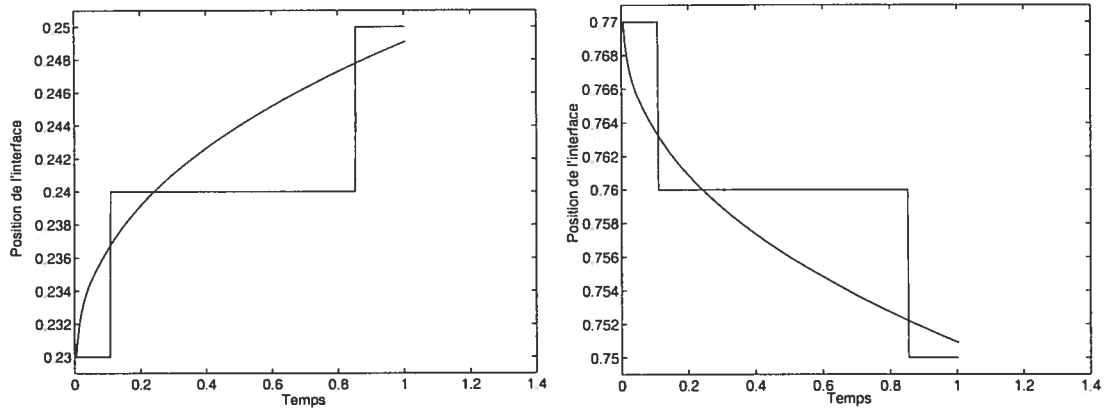


FIG. 4.3.14. Figure à gauche, position de l'interface Σ^a , méthode [1] et méthode avec suivi de front, figure à droite, position de l'interface Σ^b , méthode [1] et méthode avec suivi de front, $T_{final} = 1$, $N = 128$

Contrairement aux expériences précédentes, on utilise ici le même pas de temps pour les deux méthodes. On choisit pour ce test le temps de calcul $T_{final} = 0.6$. La méthode explicite demande un pas de temps plus petit que celle implicite, on choisit le pas de temps utilisé par la méthode eulérienne dans [1]. On choisit une solution de référence avec un maillage de $N = 2048$ points.

On mesure la norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière. On effectue ce test sur la température T , la vitesse U et la densité ρ .

Test sur la température T

dx	Norme L_1 , Méthode [1]	Norme L_1 , Méthode de suivi de front
1/64	1.0131e-02	3.7555e-003
1/128	4.8890e-03	9.7890e-004
1/256	2.5689e-03	2.3080e-004

TAB. 4.3.10. Température T , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière

Test sur la vitesse U

dx	Norme L_1 , Méthode [1]	Norme L_1 , Méthode de suivi de front
1/64	3.4320e-04	1.2367e-004
1/128	2.1982e-04	2.8813e-005
1/256	1.5790e-04	1.0087e-005

TAB. 4.3.11. Vitesse U , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière

Test sur la densité ρ

dx	Norme L_1 , Méthode [1]	Norme L_1 , Méthode de suivi de front
1/64	5.9398e+00	7.5873e-001
1/128	3.9259e+00	1.9525e-001
1/256	2.3919e+00	4.7978e-002

TAB. 4.3.12. Densité ρ , norme L_1 de l'erreur entre la solution raffinée et la solution grossière

On observe dans les tableau ci-haut une amélioration de la précision avec la méthode de suivi de front.

On peut observer l'amélioration de la précision graphiquement aussi. On présente sur le même graphique premièrement la solution grossière ($N = 64$) eulérienne de [1] et la solution raffinée ($N = 2048$), deuxièmement la solution grossière ($N = 64$) avec suivi de front et la solution raffinée ($N = 2048$). En grandissant la figure autour d'un des fronts on peut voir que la solution avec suivi de front est plus précise que la solution eulerienne de [1].

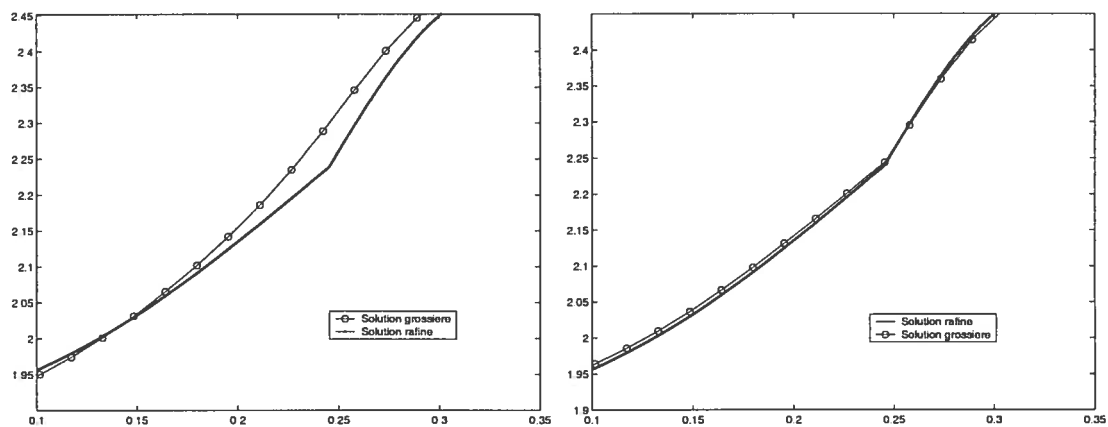


FIG. 4.3.15. Figure à gauche, température solution de [1], figure à droite, température solution avec suivi de front, $T_{final} = 0.6$.

Chapitre 5

CONCLUSION

Dans ce mémoire, on a proposé une méthode de suivi de front implicite, eulérienne, pour le système diphasique à faible nombre de Mach. La méthode est globalement conservative, et l'interface est approximée par une fonction linéaire par morceaux. La gestion de cette interface se fait par un algorithme de suivi de front. Cet algorithme nous a permis de gagner une grande précision autour de l'interface. Comparativement à la méthode eulérienne de [1], la mise au points de cette méthode de suivi de front a apporté des améliorations importantes.

- 1) Amélioration de la précision autour du front. Ceci sera très important dans des problèmes avec changement de phase.
- 2) Amélioration de la précision partout dans le domaine. La méthode de suivi de front est globalement plus précise que la méthode eulérienne de [1].
- 3) Convergence d'ordre 2. La méthode de [1] est convergente d'ordre 1.

Donc il y a des améliorations accomplies par rapport à la méthode de [1], mais on se pose la question : par rapport au problème diphasique à faible nombre de Mach, est ce qu'il y a des progrès ? Est ce que la méthode qu'on a mis en oeuvre est efficace pour ce problème ?

Comparativement à la méthode eulérienne de [1], le pas de temps de la méthode

de suivi de front est plus grand. La méthode effectue moins d'itérations dans le temps. Tenant compte du travail que le solveur implicite doit effectuer à chaque pas de temps pour calculer la solution du problème, on se pose la question : est ce que le pas de temps est suffisamment grand pour justifier cet énorme travail ? Il y a des améliorations comparativement à la méthode eulérienne de [1], mais par rapport au problème diphasique à faible nombre de Mach, on dirait NON. On n'a pas réussi à travailler avec des pas de temps très grands. On rappelle ici la grandeur de la vitesse et la condition CFL. La vitesse est à peu près d'ordre 10^{-3} - 10^{-4} et le pas de temps doit être tel que $u \frac{dt}{dx} = CFL \leq 1$ et donc $dt < CFL * dx / u$. Par exemple, pour $N=100$, $dt < 100 dx$. Numériquement, un tel dt devrait être acceptable. Il reste du travail à faire pour comprendre pourquoi on n'a pas réussi à effectuer des simulations numériques avec des pas de temps si grands. Une question jointe à cela est : est ce que le problème physique tel que posé nous permet de travailler avec des pas de temps si grands ?

Un autre objectif de ce mémoire était d'obtenir un schéma eulérien afin d'ouvrir le chemin à des simulations en deux dimensions spatiales. L'interface est maintenant une courbe et le suivi de l'interface peut se faire par des méthodes de *level set*. En deux dimensions, on pourrait séparer le problème diphasique en deux sous-problèmes en une dimension spatiale en faisant appel à des méthodes à pas fractionnaires. L'idée est de combiner la résolution unidimensionnelle de chaque sous-problème pour donner un algorithme de résolution du problème bidimensionnel. Le couplage des idées traitées dans ce mémoire avec les méthodes de type *level set* est une proposition très intéressante à considérer dans des travaux à suivre dans l'avenir.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] S. Dellacherie, *Dérivation du système diphasique bas Mach. Simulation numérique en géométrie monodimensionnelle*, Rapport de recherche CRM., Décembre 2003.
- [2] J. Hilditch, P. Colella, *A front tracking method for compressible flames in one-dimension*, SIAM J. Sc. Comp, 16 (1995), pp. 755-772.
- [3] Randall J. LeVeque, *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, Series : Cambridge Texts in Applied Mathematics, 31 (2002).
- [4] H.C. Yee, R.F. Warming, A. Harten, *An implicit total variation diminishing (TVD) schemes for steady-state calculations*, J. Comp. Phys., 57 (1985), pp. 327-360.
- [5] A. Harten, *High resolution schemes for hyperbolic conservation laws*, J. Comp. Phys., 49 (1983), pp. 357-393.
- [6] A. Majda, J.A. Sethian, *The derivation and numerical solution of the equations for zero Mach number combustion*, Combust. Sci. and Tech., 42 (1985), pp. 185-205.